

Technická univerzita v Liberci

FAKULTA PŘÍRODOVĚDNĚ-HUMANITNÍ A PEDAGOGICKÁ

Katedra: Chemie
Studijní program: Chemie
Studijní obor: CH - MA

ROZŠÍŘENÍ DATABÁZÍ HYDRATAČNÍCH VELIČIN ORGANICKÝCH LÁTEK VE VODNÝCH ROZTOCÍCH

EXTENSION OF THE DATABASES OF HYDRATION PROPERTIES OF AQUEOUS ORGANIC SOLUTES

Bakalářská práce: 12-FP-KCH- 0003

Autor:

Tereza Moravcová

Podpis:

Vedoucí práce: Prof. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D.

Konzultant: -

Počet

stran	grafů	obrázků	tabulek	pramenů	příloh
76	0	0	25	55	1

V Liberci dne: 27. 4. 2012

Zadání originál BP

ČESTNÉ PROHLÁŠENÍ

Název práce: Rozšíření databází hydratačních veličin organických látek ve vodných roztocích
Jméno a příjmení autora: Tereza Moravcová
Osobní číslo: P09001103

Byl/a jsem seznámen/a s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů, zejména § 60 – školní dílo.

Prohlašuji, že má bakalářská práce je ve smyslu autorského zákona výhradně mým autorským dílem.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědoma povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracovala samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce.

Prohlašuji, že jsem do informačního systému STAG vložila elektronickou verzi mé bakalářské práce, která je identická s tištěnou verzí předkládanou k obhajobě a uvedla jsem všechny systémem požadované informace pravdivě.

V Liberci dne: 27. 4. 2012

Tereza Moravcová

PODĚKOVÁNÍ

Děkuji všem, bez nichž by nemohla má bakalářská práce vzniknout. Především mým rodičům a prarodičům za finanční a morální podporu při tvorbě BP. Největší dík patří prof. Ing. Josefu Šedlbauerovi, Ph.D. za jeho vstřícnost, rady a trpělivost. Dále bych chtěla poděkovat Mgr. Martinu Slavíkovi, Ph.D. za trpělivé vysvětlování při úvodu do statistiky a v neposlední řadě celé KCH za jejich motivaci a vstřícnost při mém studiu.

ANOTACE

Bakalářská práce se zaměřuje na rozšíření a doplnění existujících databází hydratačních veličin organických látek na KCH. Konkrétně se jedná o následující veličiny: hydratační Gibbsova energie, hydratační entalpie, hydratační tepelná kapacita a parciální molární objem. Byla provedena literární rešerše v primárních zdrojích. Získané zdroje byly prověřeny na přítomnost primárních experimentálních dat a tato data byla převedena na jednotný formát hydratačních veličin pomocí vhodných termodynamických vztahů. Takto zpracovaná data byla následně vložena do existujících unikátních databází hydratačních veličin. V poslední fázi byla provedena konfrontace s daty stávajícími v dané databázi a diskuse.

KLÍČOVÁ SLOVA

Gibbsova energie, entalpie, tepelná kapacita, molární objem, aktivitní koeficient, Henryho konstanta, vodné roztoky

ANNOTATION

The present bachelor's thesis provides a supplement to the existing databases of hydration quantities of organic compounds on KCH. Specifically, the following quantities are concerned: Gibbs energy of hydration, hydration enthalpy, hydration heat capacity and partial molar volume. A research of primary sources was conducted. The acquired sources were tested on the presence of primary experimental data that were consequently transferred onto a uniform format of hydration quantities by means of suitable thermodynamic relations. The data, being processed this way, were inserted into the existing unique databases of hydration quantities. In the final phase a confrontation with the data already existing in the database was performed along with the discussion.

KEYWORDS

Gibbs energy, enthalpy, heat capacity, molar volume, activity coefficient, Henry's law constant, aqueous solutions

OBSAH

OBSAH	6
SEZNAM TABULEK	8
1 ÚVOD	9
2 TEORETICKÁ ČÁST	10
2.1 Parciální molární veličiny	10
2.2 Rozpouštěcí veličiny	11
2.3 Standardní stav nekonečné zředění	12
2.4 Hydratační veličiny	12
2.5 Standardní stav	14
2.6 Gibbsova energie	14
2.6.1 Chemický potenciál	14
2.6.2 Henryho konstanta	16
2.6.3 Konkrétní přepočet Henryho konstanty	19
2.7 Gibbsova energie a z ní odvozené veličiny	20
2.8 Měřené veličiny	21
3 PRAKTICKÁ ČÁST	22
3.1 Rešerše	22
3.2 Rešeršní tabulka	22
3.3 Výpočty Gibbsovy energie	32
3.3.1 Dohnal et al. 2010	32
3.3.2 Hwang et al. (2010)	33
3.3.3 Böhme et al. (2008)	35
3.3.4 Hertel et al. (2007)	37
3.4 Výpočty ostatních veličiny	37
4 ZÁVĚR A DISKUSE	38

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	44
PŘÍLOHA A	49

SEZNAM TABULEK

Tabulka 1: Schéma hydratace	13
Tabulka 2: Rešeršní tabulka.....	24
Tabulka 3: Parametry pro výpočet Henryho konstanty	32
Tabulka 4: Přepočet Henryho konstanty 1/2.....	32
Tabulka 5: Přepočet Henryho konstanty 2/2.....	33
Tabulka 6: Gibbsova energie 1/2 Dohnal et al. (2010).....	33
Tabulka 7: Gibbsova energie 2/2 Dohnal et al. (2010).....	33
Tabulka 8: Hustota vody	34
Tabulka 9: Henryho konstanta	34
Tabulka 10: Přepočet Henryho konstanty	34
Tabulka 11: Gibbsova energie Hwang et al. (2010)	34
Tabulka 12: Henryho konstanta 1/2.....	35
Tabulka 13: Henryho konstanta 2/2.....	35
Tabulka 14: Hustota vody 1/2.....	35
Tabulka 15: Hustota vody 2/2.....	35
Tabulka 16: Přepočet Henryho konstanty 1/2.....	36
Tabulka 17: Přepočet Henryho konstanty 2/2.....	36
Tabulka 18: Gibbsova energie 1/2 Böhme et al. (2008)	36
Tabulka 19: Gibbsova energie 2/2 Böhme et al. (2008).....	36
Tabulka 20: Výpočet Henryho konstanty	37
Tabulka 21: Gibbsova energie Hertel et al. (2007).....	37
Tabulka 22: Porovnání Gibbsovy energie	38
Tabulka 23: Porovnání tepelných kapacit.....	39
Tabulka 24: Porovnání entalpií.....	39
Tabulka 25: Porovnání objemů.....	40
Tabulka 26: Příloha A	50

1 ÚVOD

Cílem bakalářské práce je rozšíření a doplnění na KCH existujících databází hydratačních veličin organických látek ve vodných roztocích. Konkrétně se jedná o následující veličiny: hydratační Gibbsova energie, hydratační entalpie, hydratační tepelná kapacita a hydratační (resp. parciální molární) objem. Při tvorbě bakalářské práce bylo zapotřebí provést literární rešerši v primárních zdrojích od roku 2007 do současnosti, konkrétně do června 2011. Z důvodu kontroly úplnosti seskupených dat v databázi byla rešerše provedena již od roku 2006. Literární rešerše byla uskutečněna na portálu Web of Science a přímo ve vybraných odborných časopisech. Práce se zabývá kromě výše uvedených veličin i veličinami příbuznými, zejména Henryho konstantou, limitním aktivitním koeficientem, rozpouštěcí entalpií, parciální molární tepelnou kapacitou. Získané zdroje byly prověřeny na přítomnost primárních experimentálních dat a tato data byla převedena na jednotný formát hydratačních veličin pomocí vhodných termodynamických vztahů. Takto zpracovaná data byla následně vložena do existujících unikátních databází hydratačních veličin. Každému vloženému údaji bylo zapotřebí přiřadit odhadnutou experimentální chybu, založenou na publikovaných experimentálních nejistotách a použité experimentální technice. V poslední fázi bylo potřeba provést konfrontaci s daty stávajícími v dané databázi. Tyto veličiny lze využít k vývoji odhadových postupů (zejména strukturně příspěvková metoda) termodynamického chování neměřených chemických látek a získat tak údaje, nezbytné např. pro modelování distribuce těchto látek mezi složky životního prostředí.

2 TEORETICKÁ ČÁST

Následující kapitoly se zabývají stručným popisem veličin a pojmů, které jsou dále v bakalářské práci užívány: parciální molární veličiny, hydratační veličiny, rozpouštěcí veličiny, standardní stav nekonečného zředění, Gibbsova energie, Henryho konstanta, entalpie, parciální molární tepelná kapacita, parciální molární objem. Použité reference: Dohnal et al. 1997, Slavík 2006, Sedláčková 2005, Šedlbauer 2009.

2.1 Parciální molární veličiny

Parciální molární veličiny určují vlastnosti jednotlivých složek ve směsi. Veličiny jsou definovány relací pro i -tou složku:

$$\bar{Y}_i = \left(\frac{\partial Y}{\partial n_i} \right)_{T,p,n_j \neq i} \quad (1)$$

Y ... extenzivní veličina [...]

n_i ... počet molů látky i [mol]

T ... teplota [K], ve směsi konstantní

p ... tlak [Pa], ve směsi konstantní

Z této definice můžeme vyjádřit pomocí Eulerovy relace další vztahy:

$$Y = \sum_{i=1}^k n_i \bar{Y}_i \quad (2)$$

tedy

$$Y_m = \sum_{i=1}^k x_i \bar{Y}_i \quad (3)$$

Y ... extenzivní veličina [...]

\bar{Y}_i ... parciální molární veličina složky i [...]

n_i ... počet molů složky i [mol]

x_i ... molární zlomek složky i [-], [-] ... bezrozměrná veličina

Následně pro Gibbsovu energii platí dle vztahu (1):

$$\bar{G}_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,p,n_{j \neq i}} = \mu_i \quad (4)$$

G ... Gibbsova energie [kJ]

n_i ... počet molů látky i [mol]

T ... teplota [K], ve směsi konstantní

p ... tlak [Pa], ve směsi konstantní

μ_i ... chemický potenciál složky i [–]

Respektive podle vztahu (2):

$$G = \sum_{i=1}^k n_i \bar{G}_i = \sum_{i=1}^k n_i \mu_i \quad (5)$$

\bar{G}_i ... molární Gibbsova energie složky i [kJ]

n_i ... počet molů látky i [mol]

μ_i ... chemický potenciál složky i [–]

2.2 Rozpouštěcí veličiny

Termodynamické veličiny, které vyjadřují změnu při rozpouštění látky v rozpouštědle se nazývají rozpouštěcí veličiny:

$$\Delta Y_{sol} = Y - \sum_{i=1}^k n_i Y_i \quad (6)$$

Y ... extenzivní veličina [–]

n_i ... počet molů látky i [mol]

Y_i ... extenzivní veličina složky i [–]

2.3 Standardní stav nekonečné zředění

Standardním stavem nekonečného zředění rozumíme roztok látky, kde její koncentrace, obvykle vyjádřená molárním zlomkem $x_i \rightarrow 0$ a molární zlomek rozpouštědla (nejčastěji voda) $x_w \rightarrow 1$.

2.4 Hydratační veličiny

Hydratační veličiny se uvádějí jako rozdíl mezi veličinou odpovídající rozpuštěné látce ve stavu nekonečného zředění Y_i° za dané teploty a tlaku a veličinou příslušné čisté látky ve stavu ideálního plynu Y_i^{ig} za dané teploty a standardního tlaku:

$$\Delta_{hyd} Y_i = Y_i^\circ(T, p) - Y_i^{ig}(T, p^\circ) \quad (7)$$

Y_i° ... extenzivní veličina ve stavu nekonečného zředění složky i [...]

T ... teplota [K]

p ... tlak [Pa]

Y_i^{ig} ... extenzivní veličina ve stavu ideálního plynu složky i [...]

p° ... standardní tlak [$p = 101325 \text{ Pa}$]

Změnu veličiny ve stavu nekonečného zředění z referenčních podmínek na konečnou teplotu a tlak lze vyjádřit pomocí termodynamického cyklu:

$$[\Delta Y_i^\circ]_{T_r, p_r}^{T, p} = -\Delta_{hyd} Y_i(T_r, p_r) + [Y_i^{ig}]_{T_r}^T + \Delta_{hyd} Y_i(T, p) \quad (8)$$

$\Delta_{hyd} Y_i(T_r, p_r)$... hydratační veličina při referenčním tlaku a referenční teplotě [...]

Y_i^{ig} ... extenzivní veličina ve stavu ideálního plynu složky i [...]

$\Delta_{hyd} Y_i(T, p)$... hydratační veličina při tlaku a teplotě složky i [...]

V následujícím schématu je tento rozdíl $[\Delta Y_i^\circ]_{T_r}^T$ znázorněn graficky:

Tabulka 1: Schéma hydratace

Roztok (T_r, p_r)
- hydratace
Čistá látka ve stavu ideálního plynu (T_r, p°)
- izobarický ohřev
Čistá látka ve stavu ideálního plynu (T, p°)
hydratace
Roztok (T, p)

Pomocí předchozích relací (6) dostáváme vztahy termodynamických veličin při nekonečném zředění:

$$Y_i^\circ = Y_i + \Delta_{sol} Y_i \quad (9)$$

Y_i° ... extenzivní veličina ve stavu nekonečného zředění složky $i[\dots]$

Y_i ... extenzivní veličina složky $i[\dots]$

$\Delta_{sol} Y_i$... rozpouštěcí veličina složky $i[\dots]$

A pro hydratační veličiny podle (7):

$$Y_i^\circ = Y_i^{ig} + \Delta_{hyd} Y_i \quad (10)$$

Y_i° ... extenzivní veličina ve stavu nekonečného zředění složky $i[\dots]$

Y_i^{ig} ... extenzivní veličina ve stavu ideálního plynu složky $i[\dots]$

$\Delta_{hyd} Y_i$... hydratační veličina složky $i[\dots]$

2.5 Standardní stav

Standardní stav nekonečného zředění závisí na volbě koncentrační jednotky, kterou bývá molární zlomek, molární koncentrace popř. molalita. Číselné hodnoty chemického potenciálu a odvozených veličin v této práci odpovídají standardnímu stavu *jednotkové molality extrapolované na nekonečné zředění*.

2.6 Gibbsova energie

2.6.1 Chemický potenciál

Rovnováha mezi kapalnou a plynnou fází je vyjádřena jako rovnost chemických potenciálů za podmínek rovnosti tlaku a teploty:

$$\mu_i^{aq} = \mu_i^g \quad (11)$$

μ_i^{aq} ... chemický potenciál vodného roztoku[–]

μ_i^g ... chemický potenciál plynné fáze[–]

Chemický potenciál složky v plynné fázi je:

$$\mu_i^g = \mu_i^{ig} + RT \ln \left(\frac{f_i}{p^\circ} \right) \quad (12)$$

μ_i^{ig} ... standardní chemický potenciál ve stavu ideálního plynu[–]

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

f_i ... fugacita i -té složky [Pa]

p° ... standardní tlak [$p = 101325 \text{ Pa}$]

Definice chemického potenciálu složky ve vodném roztoku je:

$$\mu_i^{ag} = \mu_i^\circ + RT \ln \left(x_i \gamma_i^{[x]} \right) \quad (13)$$

μ_i° ... standardní chemický potenciál ve vodném roztoku [–]

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

x_i ... molární zlomek složky v roztoku [–]

γ_i ... aktivitní koeficient [–]

Rozdíl standardních chemických potenciálů se nazývá hydratační Gibbsova energie:

$$\Delta G_{hyd} = \mu_i^\circ - \mu_i^{ig} \quad (14)$$

μ_i° ... standardní chemický potenciál ve vodném roztoku [–]

μ_i^{ig} ... standardní chemický potenciál ve stavu ideálního plynu [–]

Po spojení vzorců (12-14):

$$\Delta G_{hyd} = \mu_i^\circ - \mu_i^{ig} = RT \ln \left(\frac{f_i}{p^\circ x_i \gamma_i^{[x]}} \right) \quad (15)$$

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

x_i ... molární zlomek složky v roztoku [–]

γ_i ... aktivitní koeficient [–]

f_i ... fugacita i -té složky [Pa]

p° ... standardní tlak [$p = 101325 \text{ Pa}$]

2.6.2 Henryho konstanta

Henryho konstanta je podílem fugacity rozpuštěné složky a jejího molárního zlomku, popř. součinem standardní fugacity čisté kapalné složky a limitního aktivitního koeficientu rozpuštěné látky za teploty a tlaku systému:

$$K_H = \lim_{x_1 \rightarrow 0} \frac{f_1^{(l)}}{x_1} = \lim_{x_1 \rightarrow 0} \frac{\gamma_1 x_1 f_1^{\circ(l)}}{x_1} = \gamma_1^{\infty} f_1^{\circ(l)} = [Pa] \quad (16)$$

$f_1^{(l)}$... fugacita rozpuštěného plynu v kapalně fázi [Pa]

x_1 ... molární zlomek [–]

γ_1 ... aktivitní koeficient [–]

$f_1^{\circ(l)}$... standardní fugacita čisté kapalně složky za teploty a tlaku systému [Pa]

γ_1^{∞} ... limitní aktivitní koeficient [–]

Vztahem (16) již můžeme nadefinovat výpočet Gibbsovy energie pomocí Henryho konstanty dosazením do (15):

$$\Delta G_{hyd} = RT \ln \left(\frac{K_H}{p^{\circ}} \right) \quad (17)$$

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

p° ... standardní tlak [$p = 101325 \text{ Pa}$]

K_H ... Henryho konstanta [Pa]

Protože fugacita čisté kapalně složky je rovna jejímu tlaku nasycené páry, Henryho konstanta lze také vyjádřit ve tvaru:

$$K_H = \gamma^{\infty} p^{sat} = [Pa] \quad (18)$$

γ^{∞} ... limitní aktivitní koeficient [–]

p^{sat} ... tlak nasycené páry [Pa]

Modifikací Henryho konstanty v literatuře je celá řada, jejich přehled podává např. (Staudinger, Roberts 2001):

- H_{cc} je vyjádření Henryho konstanty pomocí podílu koncentrace látky v plynné fázi a koncentrace látky v kapalně fázi.

$$H_{cc} = \frac{c_G}{c_L} \quad \left[\frac{\text{mol}_{i,G}/\text{m}_G^3}{\text{mol}_{i,L}/\text{m}_L^3} \right] = \left[\frac{g_{i,G}/\text{m}_G^3}{g_{i,L}/\text{m}_L^3} \right] = [-] \quad (19)$$

c_G ... koncentrace látky v plynné fázi $\left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$

c_L ... koncentrace látky v kapalně fázi $\left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$

- H_{yx} je poměr molárního zlomku látky v plynné fázi ku molárnímu zlomku látky v kapalně fázi.

$$H_{yx} = \frac{y_i}{x_i} \quad \left[\frac{\text{mol}_{i,G}/\text{mol}_G}{\text{mol}_{i,L}/\text{mol}_L} \right] = \left[\frac{g_{i,G}/\text{mol}_G}{g_{i,L}/\text{mol}_L} \right] = [-] \quad (20)$$

y_i ... molární zlomek látky v plynné fázi $[-]$

x_i ... molární zlomek látky v kapalně fázi $[-]$

- Další varianta Henryho konstanty H_{px} je vyjádřena jako součin molárního zlomku látky v plynné fázi a celkovému tlaku nad systémem ku molárnímu zlomku látky v kapalně fázi.

$$H_{px} = \frac{y_i P_T}{x_i} \quad \left[\frac{\text{mol}_{i,G}/\text{mol}_G}{\text{mol}_{i,L}/\text{mol}_L} (kPa) \right] = [kPa] \quad (21)$$

y_i ... molární zlomek látky v plynné fázi $[-]$

P_T ... celkový tlak nad systémem $[kPa]$

x_i ... molární zlomek látky v kapalně fázi $[-]$

- Následující vztah, označen H'_{px} , je obdobný jako (3), jen s rozdílem celkového tlaku nad systémem, který je uveden v jednotkách atm .

$$H'_{px} = \frac{y_i P_T}{x_i} \left[\frac{mol_{i,G}/mol_G}{mol_{i,L}/mol_L} (atm) \right] = [atm] \quad (22)$$

y_i ... molární zlomek látky v plynné fázi[–]

P_T ... celkový tlak nad systémem[atm]

x_i ... molární zlomek látky v kapalně fázi[–]

- H_{pc} je vyjádření součinu molárního zlomku látky v plynné fázi a celkovému tlaku nad systémem ku koncentraci látky v kapalně fázi.

$$H_{pc} = \frac{y_i P_T}{c_L} \left[\frac{mol_{i,G}/mol_G}{mol_{i,L}/m_L^3} (kPa) \right] = \left[\frac{m_L^3}{mol_{i,L}} (kPa) \right] \quad (23)$$

y_i ... molární zlomek látky v plynné fázi[–]

P_T ... celkový tlak nad systémem [kPa]

c_L ... koncentrace látky v kapalně fázi $\left[\frac{mol}{m^3} \right]$

- H'_{pc} je podobný jako vztah (5), s rozdílem jednotek atm .

$$H'_{pc} = \frac{y_i P_T}{c_L} \left[\frac{mol_{i,G}/mol_G}{mol_{i,L}/L_L} (atm) \right] = \left[\frac{L_L}{mol_{i,L}} (atm) \right] \quad (24)$$

y_i ... molární zlomek látky v plynné fázi[–]

P_T ... celkový tlak nad systémem [atm]

c_L ... koncentrace látky v kapalně fázi $\left[\frac{mol}{m^3} \right]$

Tyto definice Henryho konstant lze mezi sebou přepočítat přes následující vztahy:

$$\begin{aligned} H_{cc} &= H_{yx} \left(\frac{\rho_G}{MW_G} \right) \left(\frac{MW_L}{\rho_L} \right) = H_{px} \left(\frac{1}{RT} \right) \left(\frac{MW_L}{\rho_L} \right) = \\ &= H'_{px} \left(\frac{1}{RT} \right) \left(\frac{MW_L}{\rho_L} \right) = H_{pc} \left(\frac{1}{RT} \right) = H'_{pc} \left(\frac{1}{RT} \right) \end{aligned} \quad (25)$$

ρ_G ... hustota vzduchu, přepočet přes stavovou rovnici ideálního plynu [kg/m^3]

MW_G ... molekulová hmotnost vzduchu [$MW_G = 0.029 \text{ kg/mol}$]

ρ_L ... hustota vody [kg/m^3]

MW_L ... molekulová hmotnost vody [$MW_L = 0.018 \text{ kg/mol}$]

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

2.6.3 Konkrétní přepočet Henryho konstanty

Jestliže Henryho konstanta bude zadána např. ve formě H_{cc} , bude proveden následovný výpočet Gibbsovy energie:

$$H_{px} = H_{cc} \left(\frac{RT}{1} \right) \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right) (MW_L) \quad (26)$$

H_{cc} ... Henryho konstanta [–]

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

ρ_L ... hustota vody [kg/m^3]

MW_L ... molekulová hmotnost vody [$MW_L = 0.018 \text{ kg/mol}$]

A H_{px} bude dosazen do vzorce :

$$\Delta G_{hyd} = RT \ln \left(\frac{H_{px}}{p^\circ} \right) = [J/mol] \quad (27)$$

R ... univerzální plynová konstanta [$R = 8.314 \text{ J/K mol}$]

T ... teplota [K]

p° ... standardní tlak [$p = 101325 \text{ Pa}$]

H_{px} ... Henryho konstanta [Pa]

2.7 Gibbsova energie a z ní odvozené veličiny

Hydratační Gibbsova energie je prakticky nejpoužitelnější veličinou pro termodynamický popis látek ve vodných roztocích. Na tuto veličinu lze aplikovat běžné termodynamické vztahy, kterými získáme další hydratační veličiny – hydratační entalpii, hydratační tepelnou kapacitu a hydratační objem, který je roven parciálnímu molárnímu objemu.

Výraz pro hydratační entalpii vypadá takto:

$$\Delta H_{hyd} = -T^2 \left(\frac{\partial \left(\frac{\Delta G_{hyd}}{T} \right)}{\partial T} \right)_p \quad (28)$$

ΔH_{hyd} ... hydratační entalpie [J/mol]

ΔG_{hyd} ... hydratační Gibbsova energie [J/mol]

T ... teplota [K]

p ... tlak [Pa]

Derivací entalpie podle teploty získáme tepelnou kapacitu:

$$\Delta C_{p,hyd} = \left(\frac{\partial \Delta H_{hyd}}{\partial T} \right)_p = -T \left(\frac{\partial^2 \Delta G_{hyd}}{\partial T^2} \right)_p \quad (29)$$

$\Delta C_{p,hyd}$... hydratační tepelná kapacita [$J/K mol$]

ΔH_{hyd} ... hydratační entalpie [J/mol]

ΔG_{hyd} ... hydratační Gibbsova energie [J/mol]

T ... teplota [K]

p ... tlak [Pa]

První derivací podle tlaku získáme hydratační objem:

$$\Delta V_{hyd} = \left(\frac{\partial G_{hyd}}{\partial p} \right)_T \quad (30)$$

ΔV_{hyd} ... parciální molární objem [cm^3/mol]

ΔG_{hyd} ... hydratační Gibbsova energie [J/mol]

T ... teplota [K]

p ... tlak [Pa]

Vztahy (28)-(30) ukazují význam dalších hydratačních veličin: jejich integrací lze získat popis teplotní a tlakové závislosti hydratační Gibbsovy energie. Protože tyto další hydratační veličiny je poměrně snadné experimentálně určit, resp. lze změřit veličiny jako hustota nebo tepelná kapacita roztoků a jejich extrapolací se dostat k hydratačním veličinám, jsou hydratační entalpie, objem a tepelná kapacita hlavní „datovou základnou“ pro výpočty hydratační Gibbsovy energie za zvýšených teplot či tlaků.

2.8 Měření veličiny

Primární data pro *parciální molární objemy* jsou hustoty roztoků, které jsou měřeny při nízkých koncentracích rozpuštěné látky a jsou přepočítávány na parciální molární objemy a extrapolovány na stav nekonečného zředění (parciální molární objemy ve stavu nekonečného zředění se rovnají hydratačním objemům). Pro *hydratační tepelné kapacity* jsou měřeny tepelné kapacity roztoků, které jsou opět poté přepočteny na parciální molární tepelné kapacity a extrapolovány na stav nekonečného zředění. A pro *hydratační entalpii* jsou měřeny entalpie rozpouštěcí, které jsou po extrapolaci na nekonečné zředění přepočítány na hydratační entalpii. Pro Gibbsovu energii byly měřeny Henryho konstanty a limitní aktivitní koeficienty, přepočtové vztahy viz výše.

3 PRAKTICKÁ ČÁST

3.1 Rešerše

Byla provedena literární rešerše (2006 – červen 2011) v primárních zdrojích, které se týkaly termodynamických veličin organických látek ve standardním stavu nekonečného zředění – objem, tepelná kapacita, entalpie, Gibbsova energie, případně veličin od nich odvozených. Vyhledáváno bylo v portálu Web of Science s využitím souboru klíčových slov:

- (henry's constan*) OR (limiting activity) AND aqueous
- (partial OR standard) AND (volume OR heat capacity) AND aqueous
- enthalpy AND (solution OR dissolution OR hydration) AND aqueous

Dále bylo vyhledáváno na portálech časopisů: Journal of Chemical and Engineering data, Journal of Solution Chemistry, The Journal of Chemical Thermodynamics. Výsledný soubor zahrnoval cca 22000 článků, z nichž bylo vybráno a následně použito 48.

3.2 Rešeršní tabulka

V následující tabulce jsou uvedeny použité články. První sloupec označuje pořadí reference, které koresponduje s přílohovou částí této bakalářské práce. Ve druhém sloupci nalezneme zdroje ve formě *příjmení a rok vydání*

- Jeden autor: Ivanov (2009)
- Dva autoři: Bald, Kinart(2010)
- Tři a více autorů: Pourtier et al. (2009)

Třetí sloupec popisuje, o jakou látku se jedná. Sloupec s názvem originální data poskytuje informaci o druhu autory měřené veličiny ($\rho, c_p, \gamma^0, H_{sol}, H_{soln}, k, H_{cc}$) autory. Na tento sloupec navazuje pátý, který upřesňuje cílové veličiny (V^0, c_p^0, H^0, G^0), které byly zavedeny do databáze. Další v pořadí je sloupec s experimentálními chybami, někteří autoři chyby neuvedli a nelze je z textu ani věrohodně odhadnout (zn.--).

V dalších člancích, kde chyby byly uvedeny, se jednalo o statistické chyby (např. směrodatná odchylka), zde nastalo více možností:

- Chyby uvedené bez upřesnění intervalu spolehlivosti
- Chyby uvedené s intervalem spolehlivosti

Chyby s uvedeným intervalem spolehlivosti odlišným od IS 68%, který využívá databáze termodynamických veličin KCH, lze převést dle následujících vztahů (Militký, Meloun 2002):

$$68\% \dots \pm \sigma$$

$$95\% \dots \pm 2\sigma$$

Dále sem patří teplotní rozmezí v jednotkách $[K]$, tlakové rozmezí uvedené v $[MPa]$. Předposlední sloupec určuje počet příslušných veličin, které byly naměřeny. A poslední sloupec udává, jaká byla použita experimentální technika, např. vibrační hustoměr, kalorimetr a další.

Př. Autory první reference jsou Bald a Kinart. Publikace vyšla v roce 2010. Měření hustoty bylo provedeno u roztoků karboxylových kyselin, hustoty byly přepočteny na parciální molární objem a extrapolovány na nekonečné zředění. Autoři zde chyby neuvádí. Měření proběhlo 12-krát za podmínek $T = 298 K$. K měření byl použit vibrační hustoměr.

Zkratky:

ρ ... hustota $[kg/m^3]$

V^o ... parciální molární objem $[cm^3/mol]$

c_p ... tepelná kapacita $[J/K mol]$

c_p^o ... parciální molární tepelná kapacita $[J/K mol]$

H_{sol} ... entalpie rozpouštěcí $[J/mol]$

H_{soln} ... entalpie slučovací $[J/mol]$

H^o ... hydratační entalpie $[J/mol]$

k ... stlačitelnost $[-]$

γ^o ... limitní aktivitní koeficient $[-]$

K_H ... Henryho konstanta $[Pa]$

H_{cc} ... Henryho konstanta $[-]$

G^o ... hydratační Gibbsova energie $[kJ/mol]$

Tabulka 2: Rešeršní tabulka

	Zdroj	Látka	Originální data	Cílová data	Chyba	Teplotní rozmezí [K]	Tlakové rozmezí [MPa]	Počet bodů	Exp. Metoda
1	Bald, Kinart(2010)	Formic acid Acetic acid Propionic acid Butyric acid Valeric acid Hexanoic acid Oxalic acid Malonic acid Succinic acid Glutaric acid Adipic acid Pimelic acid	ρ	V°	--	298.15	0.1013	12	Vibrační hustoměr
2	Ivanov (2009)	Tetramethylurea	ρ	V°	Statistická chyba	278.15-338.15	0.1013	2	Vibrační hustoměr
3	Ivanov, Abrosimov (2007)	Tetramethylurea	ρ	V°	Statistická chyba	288.15-318.15	0.1013	4	Vibrační hustoměr
4	Pourtier et al. (2009)	Trifluoromethanesulfonic acid	ρ, C_p	$V^\circ \quad C_p^\circ$	Statistická chyba	298.19-573.89	0.10-31.0	24	Vibrační hustoměr, Kalorimetr
5	Hedwig (2009)	Ribose Deoxyribose Inosine Deoxyinosine	ρ, C_p	$V^\circ \quad C_p^\circ$	Statistická chyba	288.15-313.15	0.1013	19	Vibrační hustoměr, Kalorimetr

		Deoxyguanosine							
6	Fucaloro et al. (2008)	Uracil Thymine Adenine	ρ	V°	Statistická chyba	288.15-298.15	0.1013	11	Vibrační Hustoměr
7	Bolotov et al. (2011)	γ -Butyrolactone ϵ -Caprolactone	ρ	V°	Statistická chyba	278.15-318.15	0.1013	14	Vibrační hustoměr
8	Pitkänen et al. (2010)	Trimethylglycin	ρ	V°	--	278.15-318.15	0.1013	8	Pyknometr
9	Bernazzani et al. (2009)	Perfluorohexanoate Perfluoroheptanoate Perfluorooctanoate Perfluorononanoate	Cp	Cp°	--	298.15	0.1013	5	Kalorimetr
10	Romero, Cadena (2010)	3-Aminopropanoic acid 4-Aminobutanoic acid 5-Aminopentanoic acid 6-Aminohexanoic acid	ρ	V°	--	293.15-308.15	0.1013	16	Pyknometr
11	Dohnal et al. (2010)	Dimethyl carbonate Diethyl carbonate Vinyl acetate Methyl methacrylate	γ°	G^0	Statistická chyba	273.35-333.15	0.1013	32	Kalorimetr, Chromatografie Extrakce
12	Yeow et al. (2009)	1-Aminopropin-2-ol	ρ	V°	--	283.15-353.15	0.1013	15	Vibrační hustoměr

13	Blanco et al. (2011)	Hexamethylenetetramine	H_{sol}	H°	Statistická chyba	278.15-308.15	0.1013	4	Kalorimetr
14	Korolev et al. (2007)	Glycine Alanine Phenylalanine Histidine	H_{soln}	H°	Statistická chyba	298.15	0.1013	4	Kalorimetr
15	Egorov et al. (2010)	Ethylene glycol	ρ	V°	--	274.15-333.15	0.1013	15	Vibrační hustoměr
16	Egorov, Makarov (2009)	Dimethylsulfoxide	k	V°	--	278.15-323.15	10.0-100.0	25	Piezometr
17	Abu-Daabes, Awwad (2008)	N-(2-hydroxyethyl)morpholine	ρ	V°	--	293.15-333.15	0.1013	5	Vibrační hustoměr
18	Bayram, Ayranci (2010)	1,2-dihydroxybenzene 1,3-dihydroxybenzene 1,4-dihydroxybenzene	ρ	V°	Statistická chyba	283.15-313.15	0.1013	15	Vibrační hustoměr
19	Belandria et al. (2009)	Tetrahydrofuran	ρ	V°	--	293.15-333.15	0.1013	9	Vibrační hustoměr
20	Cibulka et al. (2010)	Glycine Alanine	ρ	V°	Statistická chyba	298.15-443.16	0.28-31.17	38	Vibrační hustoměr
21	Della Gatta et al. (2010)	Propanal Butanal 2-methylpropanal Pentanal	H_{soln}	H°	Statistická chyba	298.15	0.1013	5	Kalorimetr

2,2-dimethylpropanal									
22	Dhondge et al. (2009)	Ethylene glycol monomethyl ether Ethylene glycol monoethyl ether Diethylene glycol monomethyl ether Diethylene glycol monoethyl ether	ρ	V°	--	298.15	0.1013	4	Pyknometr
23	Duman, Ayranci (2009)	Benzyltrimethylammonium chloride Benzyltriethylammonium chloride Benzyltributylammonium chloride	ρ	V°	--	293.15-333.15	0.1013	15	Vibrační hustoměr
24	Dyke, Hedwig (2008)	Cytidine Uridine Adenosine	ρ, C_p	V° C_p°	Statistická chyba	288.15-313.15	0.1013	15	Vibrační hustoměr, Kalorimetr
25	Egorov, Makarov (2011)	2-methyl-2-propanol	ρ	V°	--	274.15-348.15	0.1	16	Vibrační hustoměr
26	Ivanov, Kustov (2010)	Hexamethylphosphoric triamide	ρ	V°	Statistická chyba	288.15-308.15	0.1013	5	Vibrační hustoměr
27	Keswani et al. (2010)	4-hydroxyproline L-proline	ρ, C_p	V° C_p°	Statistická chyba	288.15-328.15	0.1013	26	Vibrační hustoměr, Kalorimetr
28	Liu et al. (2006)	N-acetylasparaginamide N-acetylglutaminamide N-acetyltyrosinamide N-acetyllysine monohydrochloride	ρ, C_p	V° C_p°	Statistická chyba	288.15-328.15	0.1013	32	Vibrační hustoměr, Kalorimetr

29	Tome et al. (2007)	Trans-cyclohexyl-1,4-diamine Cis-cyclohexyl-1,2-diamine	H_{sol}	H°	--	298.15	0.1013	2	Kalorimetr
30	Quan Yuan et al. (2006)	L-alanine DL-serine DL-threonine L-histidine Glycine Glycylglycine	ρ	V°	Statistická chyba	298.15	0.1013	6	Vibrační hustoměr
31	Jamal, Iqbal (2011)	l-alanine l-arginine l-asparagine l-glutamic acid glycine l-histidine sl-leucine l-lysine HCl l-proline l-serine dl-threonine l-valine	ρ	V°	Statistická chyba	283.15-313.15	0.1013	48	Vibrační hustoměr
32	Nielsen et al. (2011)	Methyl tert-butyl ether	ρ K_H	H° V° G°	Statistická chyba	285.15-313.15	0.1013	6	Kalorimetr, Chromatografie, Vibrační hustoměr

33	Hwang et al. (2010)	Di-n-butyl ether Di-isopropyl ether Tert-butyl ethyl ether Tert-butyl methyl ether Propyl vinyl ether Tert-amyl methyl ether	H _{cc}	G°	--	298.15-333.15	0.1013	30	Chromatografie
34	Parmar, Attri (2007)	Potassium nitrate Ammonium sulphate Tetra-butyl ammonium bromide Tetra-butyl ammonium iodide Ammonium nickel sulphate Ammonium aluminium sulphate Potassium aluminium sulphate Ammonium ceric nitrate	ρ	V°	Statistická chyba	298-313	0.1013	32	Vibrační hustoměr
35	Romero et al. (2008)	1-butanol 1,2-butanediol 1,4-butanediol 1,2,4-butanetriol 1,2,3,4-butanetetrol	ρ	V°	--	278.15-323.15	0.1013	50	Pyknometr
36	Klofutar et al. (2007)	Tetraethylammonium Cyclohexylsulfamates Tetra-n-propylammonium Cyclohexylsulfamates tetra-n-butylammonium Cyclohexylsulfamates Tetra-n-pentylammonium Cyclohexylsulfamates	ρ	V°	Statistická chyba	293.15-333.15	0.1013	24	Vibrační hustoměr

37	Gupta, Singh (2007)	Oxalic acid	ρ	V°	Statistická chyba	293.15-323.15	0.1013	4	Vibrační hustoměr
38	Böhme et al. (2008)	Methyl tert-butyl ether Vinyl acetate Dimethyl carbonate Diethyl carbonate	H_{cc}	G°	Statistická chyba	283.15-318.15	0.1013	26	Chromatografie
39	Muhammad et al. (2008)	N-methyldiethanolamine	ρ	V°	--	298.15-338.15	0.1013	9	Vibrační hustoměr
40	Coquelet et al. (2008)	Propyl mercaptan Butyl mercaptan Dimethylsulfide	γ°	G^0	--	292.6-333.1	0.1013	10	Chromatografie
41	Della Gatta et al. (2007)	N-methylurea Urea N-ethylurea N-propylurea N-butylurea N-isobutylurea N-tert-butylurea	$C_p H_{sol}$	$H^\circ C_p^\circ$	Statistická chyba	298.15	0.1013	14	Kalorimetr
42	Cibulka et al. (2010)	Cyclopentanone Cyclohexanone Cycloheptanone Cyclohexane-1,4-dione	ρ	V°	Statistická chyba	278.15-373.17	0.10-0.52	48	Vibrační hustoměr

43	Li et al. (2007)	2-methylamino ethanol	ρ	V°	--	298.15-343.15	0.1013	6	Vibrační hustoměr
44	Blanco et al. (2008)	Tetramethylammonium bromide Tetraethylammonium bromide Tetrabutylammonium bromide	ρ	V°	Statistická chyba	278.15-298.15	0.1013	12	Vibrační hustoměr
45	Hertel et al. (2007)	Hexanal 2-methylbutanal 3-methylbutanal Dimethylsulfide	γ°	G^0	Statistická chyba	371.7	0.1013	4	Chromatografie
46	Hertel, Sommer (2006)	2-furfural γ -nonalactone Benzaldehyde Linalool	γ°	G^0	Statistická chyba	373.15	0.1013	4	Cirkulační aparát
47	Sadeghi, Ziamajidi (2007)	Tripotassium Citrate	ρ	V°	--	288.15-313.15	0.1013	6	Vibrační hustoměr
48	Kharat (2008)	Cesium trifluoroacetate	ρ	V°	Statistická chyba	298.15-313.15	0.1013	4	Pyknometr

3.3 Výpočty Gibbsovy energie

Gibbsova energie se do databáze vkládá ve formě hydratační Gibbsovy energie. Primární data pro výpočty Gibbsovy energie jsou Henryho konstanty a limitní koeficienty, které musely být vhodně přepočítány. V následující kapitole jsou demonstrovány příklady výpočtu Gibbsovy energie z různých primárních dat.

3.3.1 Dohnal et al. 2010

V tomto článku byly zadány parametry korelačního vztahu pro výpočet Henryho konstanty, ze kterých byla následně vypočítána Gibbsova energie při několika zvolených teplotách.

Tabulka 3: Parametry pro výpočet Henryho konstanty

	A_H	B_H	C_H
Dimethyl carbonate	43.5430	-37.6982	-20.9153
Diethyl carbonate	66.7681	-60.4491	-39.8940
Vinyl acetate	56.3337	-48.4032	-32.8603
Methyl methacrylate	61.7442	-54.2469	-36.3226

Henryho konstanta se spočítá přes vztah:

$$K_H = e^{A_H + \frac{B_H}{\tau} + C_H + \ln \tau} \quad (31)$$

kde τ se spočítá:

$$\tau = \frac{T}{298.15} \quad (32)$$

Tabulka 4: Přepočet Henryho konstanty 1/2

K_H [Pa]	273.35 [K]	283.15[K]	293.15[K]	298.15[K]
τ	0.917	0.950	0.983	1000
Dimethyl carbonate	68580	135956	254319	339327
Diethyl carbonate	72683	174202	381640	544419
Vinyl acetate	585968	1142546	2074130	2714332
Methyl methacrylate	302654	651115	1292623	1762384

Tabulka 5: Přepočet Henryho konstanty 2/2

$K_H[\text{Pa}]$	303.15[K]	313.15[K]	323.15[K]	333.15[K]
τ	1.017	1.050	1.084	1.117
Dimethyl carbonate	445885	737824	1159298	1738775
Diethyl carbonate	759180	1385992	2343828	3701232
Vinyl acetate	3488998	5484669	8116703	11380776
Methyl methacrylate	2354715	3973746	6264018	9290302

Gibbsova energie se spočítá přes relaci (17):

$$G = RT \ln \frac{K_H}{p^0}$$

Tabulka 6: Gibbsova energie 1/2 Dohnal et al. (2010)

G (kJ/mol)	273.35 [K]	283.15 [K]	293.15 [K]	298.15 [K]
Dimethyl carbonate	-10.017	-8.765	-7.548	-6.962
Diethyl carbonate	-9.885	-8.182	-6.559	-5.791
Vinyl acetate	-5.142	-3.754	-2.433	-1.808
Methyl methacrylate	-6.643	-5.078	-3.586	-2.879

Tabulka 7: Gibbsova energie 2/2 Dohnal et al. (2010)

G (kJ/mol)	303.15 [K]	313.15 [K]	323.15 [K]	333.15 [K]
Dimethyl carbonate	-6.391	-5.290	-4.245	-3.254
Diethyl carbonate	-5.050	-3.649	-2.354	-1.161
Vinyl acetate	-1.206	-0.068	0.983	1.950
Methyl methacrylate	-2.197	-0.907	0.287	1.388

3.3.2 Hwang et al. (2010)

Henryho konstanta zadaná ve formě H_{cc} . Přepočet přes vztahy (26) a (27):

$$H_{px} = H_{cc} \left(\frac{RT}{1} \right) \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right)$$

A H_{px} bylo dosazeno do vzorce :

$$G = RT \ln \left(\frac{H_{px}}{p^0} \right)$$

Tabulka 8: Hustota vody

Teplota [K]	298.15	318.15	323.15	328.15	333.15
ρ_L [kg/m ³]	997.002	990.169	987.991	985.649	983.151

Tabulka 9: Henryho konstanta

$H_{CC}[-]$	298.15[K]	318.15[K]	323.15[K]	328.15[K]	333.15[K]
DBE	0.301995172	0.389045145	0.812830516	1.148153621	1.584893192
DIPE	0.095499259	0.134896288	0.245470892	0.301995172	0.446683592
ETBE	0.028183829	0.044668359	0.114815362	0.158489319	0.295120923
MTBE	0.047863009	0.064565423	0.077624712	0.083176377	0.138038426
PVE	0.257039578	0.323593657	0.426579519	0.549540874	0.602559586
TAME	0.023988329	0.044668359	0.1	0.141253754	0.165958691

Tabulka 10: Přepočet Henryho konstanty

H_{px} [Pa]	298.15[K]	318.15[K]	323.15[K]	328.15[K]	333.15[K]
DBE	746347.12	1018946.24	2157581.30	3087483.99	4315886.98
DIPE	236015.68	353306.21	651579.14	812091.03	1216382.22
ETBE	69653.17	116990.68	304766.46	426191.43	803655.76
MTBE	118288.05	169102.98	206047.41	223668.44	375898.04
PVE	635244.43	847522.57	1132314.76	1477762.75	1640854.46
TAME	59284.46	116990.68	265440.49	379843.51	451928.85

Tabulka 11: Gibbsova energie Hwang et al. (2010)

G (kJ/mol)	298.15[K]	318.15[K]	323.15[K]	328.15[K]	333.15[K]
DBE	4.950	6.105	8.217	9.322	10.392
DIPE	2.096	3.304	5.000	5.678	6.884
ETBE	-0.929	0.380	2.959	3.919	5.736
MTBE	0.384	1.355	1.907	2.160	3.631
PVE	4.550	5.618	6.485	7.312	7.713
TAME	-1.329	0.380	2.587	3.605	4.141

3.3.3 Böhme et al. (2008)

Henryho konstanta zadaná ve formě H_{cc} . Přepočet přes vztahy (26) a (27):

$$H_{px} = H_{cc} \left(\frac{RT}{1} \right) \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right)$$

A H_{px} bylo dosazeno do vzorce :

$$G = RT \ln \left(\frac{H_{px}}{p^\circ} \right)$$

Tabulka 12: Henryho konstanta 1/2

$H_{cc}[-]$	283.15 [K]	288.15 [K]	293.15 [K]	298.15 [K]
MTBE	0.0113	0.0156	-	0.0319
VAC	0.00935	0.0128	0.0163	0.0204
DEC	0.00124	0.00211	-	0.00414
DMC	0.00109	0.00153	-	0.00267

Tabulka 13: Henryho konstanta 2/2

$H_{cc}[-]$	298.15 [K]	303.15 [K]	308.15 [K]	318.15 [K]
MTBE	0.0315	-	0.0574	0.0975
VAC	0.0194	0.0254	0.0323	0.0459
DEC	0.0042	-	0.00725	0.0123
DMC	0.00258	-	0.00442	0.00662

Tabulka 14: Hustota vody 1/2

Teplota [K]	283.15 [K]	288.15 [K]	293.15 [K]
ρ_L [kg/m ³]	999.654	999.055	998.204

Tabulka 15: Hustota vody 2/2

Teplota [K]	298.15 [K]	303.15 [K]	308.15 [K]	318.15 [K]
ρ_L [kg/m ³]	997.002	995.604	993.989	990.169

Tabulka 16: Přepočet Henryho konstanty 1/2

H_{px} [Pa]	283.15 [K]	288.15 [K]	293.15 [K]	298.15 [K]
MTBE	26592.23	37337.28	-	78837.26
VAC	22003.30	30635.71	39655.81	50416.31
DEC	2918.09	5050.11	-	10231.54
DMC	2565.09	3661.93	-	6598.60

Tabulka 17: Přepočet Henryho konstanty 2/2

H_{px} [Pa]	298.15 [K]	303.15 [K]	308.15 [K]	318.15 [K]
MTBE	77848.71	-	146172.50	255361.78
VAC	47944.92	63736.46	82253.86	120216.47
DEC	10379.83	-	18462.55	32214.87
DMC	6376.18	-	11255.79	17338.41

Tabulka 18: Gibbsova energie 1/2 Böhme et al. (2008)

G (kJ/mol)	283.15 [K]	288.15 [K]	293.15 [K]	298.15 [K]
MTBE	-3.149	-2.392	-	-0.622
VAC	-3.595	-2.866	-2.286	-1.730
DEC	-8.351	-7.184	-	-5.684
DMC	-8.655	-7.954	-	-6.771

Tabulka 19: Gibbsova energie 2/2 Böhme et al. (2008)

G (kJ/mol)	298.15 [K]	303.15 [K]	308.15 [K]	318.15 [K]
MTBE	-0.653	-	0.939	2.445
VAC	-1.855	-1.168	-0.534	0.452
DEC	-5.648	-	-4.362	-3.031
DMC	-6.856	-	-5.630	-4.670

3.3.4 Hertel et al. (2007)

Henryho konstanta se z tohoto článku vypočítá přes následující relaci (18):

$$H_{px} = \gamma^{\infty} p^{sat} = [Pa]$$

A H_{px} bylo dosazeno do vzorce (27) :

$$G = RT \ln \left(\frac{H_{px}}{p^{\circ}} \right)$$

Tabulka 20: Výpočet Henryho konstanty

371.7[K]	γ	p^{sat} (kPa)	H_{px} (kPa)
hexanal	121.1	40.400	4892.44
2-methylbutanal	45.4	128.400	5829.36
3-methylbutanal	46.4	121.100	5619.04
dimethylsulfide	13.4	572.400	7670.16

Tabulka 21: Gibbsova energie Hertel et al. (2007)

371.7[K]	G (kJ/mol)
hexanal	-0.433
2-methylbutanal	0.108
3-methylbutanal	-0.006
dimethylsulfide	0.956

3.4 Výpočty ostatních veličiny

U objemů do databáze se uvádějí parciální molární objemy, které jsou rovny hydratačnímu objemu. Do databáze tepelných kapacit jsou uváděny hodnoty parciálních molárních kapacit, které mohou být přepočítány na hydratační tepelné kapacity. Slouží k tomu další databáze tepelných kapacit ve stavu ideálního plynu, která je k dispozici a nebyla součástí této práce. Entalpie byla měřena jako rozpouštěcí, ale v použitých člancích byla přepočtena na hydratační entalpii.

4 ZÁVĚR A DISKUSE

V následujících tabulkách jsou porovnána vložená data se stávajícími daty v databázi za stejných teplot a tlaků. Celkem bylo porovnáno a vloženo 740 údajů o termodynamických veličinách organických látek. Bylo vloženo poměrně velké množství nových látek, u každé veličiny je konkrétní číslo.

Popis tabulek: V prvním sloupci je uvedena teplota v K , druhý sloupec uvádí tlaky v MPa . Ve sloupci hodnota jsou vypsané hodnoty konkrétních veličiny, rozdělené podle tabulek, které byly vloženy do databáze. Sloupec s názvem chyba obsahuje experimentální odchylku, pokud je z primárního zdroje k dispozici. Sloupec s názvy $\bar{\sigma}$ hodnota (průměrná hodnota všech nalezených dat k dané veličině příslušné látky), směrodatná odchylka (směrodatná odchylka této $\bar{\sigma}$ hodnoty) a počet bodů (počet nalezených dat k příslušné veličině a k příslušné látce za stejných podmínek) podává informaci o seskupených datech, které již byly v databázi. Poslední sloupec určuje o jakou látku se jedná.

Tabulka 22: Porovnání Gibbsovy energie

T [K]	P [MPa]	Hodnota	Chyba	$\bar{\sigma}$ Hodnota	Směrodatná odchylka	Počet bodů	Látka
Dohnal et al. (2010)							
298.15	0.1013	-1.808	0.002	-1.82	0.00	1	VINYLACETATE
298.15	0.1013	-2.879	0.003	-3.07	0.34	3	METHYL-METHACRYLATE
Hwang et al. (2010)							
298.15	0.1013	4.950	0	2.18	2.44	13	DI-N-BUTYL-ETHER
323.15	0.1013	8.217	0	8.07	0.7	1	DI-N-BUTYL-ETHER
298.15	0.1013	2.096	0	1.72	1.14	28	DI-ISOPROPYL-ETHER
323.15	0.1013	5.000	0	7.2	0.81	2	DI-ISOPROPYL-ETHER
333.15	0.1013	6.884	0	7.93	0.4	1	DI-ISOPROPYL-ETHER
Böhme et al. (2008)							
298.15	0.1013	-1.730	0.11	-1.82	0.00	1	VINYLACETATE

Pro Gibbsovy energie byly vloženy údaje pro 14 nových látek. Pouze 8 údajů ze 107 bylo možno porovnat. Údaje Gibbsovy energie se vcelku shodují v rámci odhadnutých experimentálních odchylek.

Tabulka 23: Porovnání tepelných kapacit

T [K]	P [MPa]	Hodnota	Chyba	Ø Hodnota	Směrodatná odchylka	Počet bodů	Látka
Hedwig (2009)							
298.15	0.1013	283.5	0.9	279	0	1	RIBOSE
Dyke, Hedwig (2008)							
298.15	0.1013	397.3	2.1	401.5	2.5	2	CYTIDINE
298.15	0.1013	387.7	1.8	398.5	0.5	2	URIDINE
298.15	0.1013	488.1	2.4	506.5	0.5	2	ADENOSINE
Keswani et al. (2010)							
303.15	0.1013	156	2	197	17	1	4-HYDROXYPROLINE
298.15	0.1013	184	0.5	175.99	5.33	4	L-PROLINE
303.15	0.1013	191	0.3	190.42	0.7	1	L-PROLINE
308.15	0.1013	196	0.3	196.25	0.7	1	L-PROLINE
313.15	0.1013	201	0.3	199.49	1.89	2	L-PROLINE
318.15	0.1013	206	0.3	205.92	0.7	1	L-PROLINE
323.15	0.1013	210	0.3	211.22	1.23	2	L-PROLINE
328.15	0.1013	214	0.3	220.07	6.43	2	L-PROLINE
Della Gatta et al. (2007)							
298.15	0.1013	74.2	0.6	87	0.5	2	UREA

Pro tepelné kapacity bylo vloženo 13 nových látek. Bylo možno porovnat 13 z 62 údajů. V mnoha případech je shoda horší než by odpovídalo kombinaci experimentálních chyb, což naznačuje, že u měření tepelných kapacit bývají tyto chyby mnoha autory podceňovány.

Tabulka 24: Porovnání entalpií

T [K]	P [MPa]	Hodnota	Chyba	Ø Hodnota	Směrodatná odchylka	Počet bodů	Látka
Korolev et al. (2007)							
298.15	0.1013	-122.1	0.01	-124.03	4.74	1	GLYCINE
298.15	0.1013	-136.9	0.01	-136.81	4.3	1	ALANINE
Della Gatta et al. (2007)							
298.15	0.1013	-81.80	0.275	-72.24	0	1	UREA

Do databáze entalpií bylo vloženo 17 nových látek. Bylo možno porovnat 3 z 23 údajů. Hodnota pro močovinu (urea) se zásadně liší od dosavadního zdroje a tyto údaje je třeba revidovat.

Tepelná kapacita a entalpie pro močovinu (urea) z reference Della Gatta et al. (2007) může být srovnána pouze s jediným starším údajem. Nalezené významné rozdíly nelze věrohodně přičítat starším ani novým měřením, v této situaci je potřebný třetí údaj, který by napověděl o přesnosti těchto hodnot.

Tabulka 25: Porovnání objemů

T [K]	P [MPa]	Hodnota	Chyba	Ø Hodnota	Směrodatná odchylka	Počet bodů	Látka
Bald, Kinart(2010)							
298.15	0.1013	36.90	0	34.62	0.33	4	FORMIC-ACID
298.15	0.1013	52.22	0	51.87	0.25	8	ACETIC-ACID
298.15	0.1013	67.82	0	67.9	0	1	PROPIONIC-ACID
298.15	0.1013	84.38	0	84.7	0	1	BUTYRIC-ACID
298.15	0.1013	115.83	0	116.55	0.1	1	HEXANOIC-ACID
298.15	0.1013	53.36	0	47.88	1.55	2	OXALIC-ACID
298.15	0.1013	68.11	0	66.82	0	1	MALONIC-ACID
298.15	0.1013	83.64	0	82.62	0.13	3	SUCCINIC-ACID
298.15	0.1013	98.99	0	98.52	0.47	2	GLUTARIC-ACID
298.15	0.1013	115.87	0	115.41	0.26	2	ADIPIC-ACID
298.15	0.1013	131.81	0	131.78	0	1	PIMELIC-ACID
Ivanov, Abrosimov (2007)							
298.15	0.1013	158.83	0.065	115.6	0.2	1	TETRAMETHYLUREA
Hedwig (2009)							
298.15	0.1013	95.29	0.02	95.32	0.15	6	D-RIBOSE
298.15	0.1013	94.62	0.02	93.8	0.4	1	2-DEOXYRIBOSE
Fucaloro et al. (2008)							
298.15	0.1013	72.02	0.10	72.12	0.18	2	URACIL
298.15	0.1013	89.14	0.16	88.62	0.13	2	THYMINE
298.15	0.1013	90.02	0.19	87.22	0.18	1	ADENINE
Romero, Cadena (2010)							
298.15	0.1013	58.30	0	58.38	0	1	3-AMINOPROPANOIC-ACID
298.15	0.1013	72.52	0	73.32	0.18	7	4-AMINO BUTANOIC-ACID
308.15	0.1013	72.89	0	74.37	0	2	4-AMINO BUTANOIC-ACID
298.15	0.1013	87.27	0	87.67	0.30	6	5-AMINOPENTANOIC-ACID
308.15	0.1013	87.73	0	88.4	0	2	5-AMINOPENTANOIC-ACID
298.15	0.1013	104.53	0	104.17	0.07	6	6-AMINOHEXANOIC-ACID
308.15	0.1013	105.15	0	104.96	0	2	6-AMINOHEXANOIC-ACID

Egorov et al. (2010)

278.15	0.1013	53.74	0	53.76	0	1	ETHYLENE GLYCOL
288.15	0.1013	54.16	0	54.26	0	1	ETHYLENE GLYCOL
298.15	0.1013	54.58	0	55.26	0.90	3	ETHYLENE GLYCOL
308.15	0.1013	54.94	0	55.1	0	1	ETHYLENE GLYCOL

Dyke, Hedwig (2008)

298.15	0.1013	153.88	0.02	153.76	0.31	3	CYTIDINE
298.15	0.1013	152.74	0.02	151.96	0.37	3	URIDINE
298.15	0.1013	171.34	0.18	171.41	0.03	2	ADENOSINE

Egorov, Makarov (2011)

278.15	0.1	87.89	0	87.76	0.01	2	2-METHYL-2-PROPANOL
283.15	0.1	87.80	0	87.23	0.5	2	2-METHYL-2-PROPANOL
288.15	0.1	87.61	0	87.47	0.2	2	2-METHYL-2-PROPANOL
298.15	0.1	87.72	0	87.81	0.06	4	2-METHYL-2-PROPANOL
308.15	0.1	88.22	0	88.20	0.01	2	2-METHYL-2-PROPANOL

Keswani et al. (2010)

298.15	0.1013	84.20	0.05	84.49	0	2	4-HYDROXYPROLINE
288.15	0.1013	82.52	0.02	81.92	0.40	3	L-PROLINE
298.15	0.1013	83.26	0.01	82.76	0.24	7	L-PROLINE
308.15	0.1013	83.99	0.02	83.61	0.39	2	L-PROLINE
313.15	0.1013	84.36	0.02	83.64	0,00	1	L-PROLINE

Quan Yuan et al. (2006)

298.15	0.1013	43.01	0.04	43.25	0.07	11	GLYCINE
298.15	0.1013	60.49	0.05	60.49	0.05	8	ALANINE
298.15	0.1013	76.88	0.05	76.88	0.03	4	THREONINE
298.15	0.1013	76.36	0.02	76.48	0.14	3	GLYCYL-GLYCINE
298.15	0.1013	60.06	0.04	60.67	0.06	6	SERINE

Jamal, Iqbal (2011)

293.15	0.1013	59.909	0.016	60.3	0.26	1	L-ALANINE
313.15	0.1013	62.313	0.173	61.17	0.03	2	L-ALANINE
313.15	0.1013	125.907	0.153	125.51	0	1	L-ARGININE
313.15	0.1013	99.627	0.027	79.07	0.1	1	L-ASPARAGINE
313.15	0.1013	91.831	0.026	91.62	0.1	1	L-GLUTAMIC-ACID
293.15	0.1013	41.898	0.039	43.02	0.12	1	GLYCINE
313.15	0.1013	45.211	0.061	43.97	0.05	3	GLYCINE
313.15	0.1013	109.627	0.027	109.00	0	1	L-LEUCINE
283.15	0.1013	80.986	0.017	82.07	0.20	1	L-PROLINE
313.15	0.1013	84.938	0.062	83.64	0	1	L-PROLINE
283.15	0.1013	60.289	0.047	59.65	0.31	1	L-SERINE
313.15	0.1013	62.957	0.144	61.63	0	1	L-SERINE
313.15	0.1013	92.316	0.021	91.67	0	1	L-VALINE

Parmar, Attri (2007)

298	0.1013	295.80	0.44	271.18	0	1	TETRA-BUTYL AMMONIUM-BROMIDE
-----	--------	--------	------	--------	---	---	---------------------------------

Romero et al. (2008)

278.15	0.1013	84.63	0	85.75	0.20	4	1-BUTANOL
283.15	0.1013	85.11	0	86.25	0.1	1	1-BUTANOL
288.15	0.1013	85.47	0	86.06	0.15	2	1-BUTANOL
293.15	0.1013	85.79	0	86.16	0.28	3	1-BUTANOL
298.15	0.1013	86.34	0	86.46	0.17	12	1-BUTANOL
308.15	0.1013	87.63	0	86.65	0.35	2	1-BUTANOL
313.15	0.1013	88.64	0	86.99	0.62	2	1-BUTANOL
318.15	0.1013	89.31	0	87.94	0.13	2	1-BUTANOL
323.15	0.1013	89.92	0	87.51	0.79	2	1-BUTANOL
298.15	0.1013	86.16	0	86.26	0.08	3	1,2-BUTANEDIOL
278.15	0.1013	87.88	0	87.81	0.00	2	1,4-BUTANEDIOL
283.15	0.1013	87.99	0	88	0.1	1	1,4-BUTANEDIOL
293.15	0.1013	88.19	0	88.19	0.1	1	1,4-BUTANEDIOL
298.15	0.1013	88.27	0	88.20	0.13	5	1,4-BUTANEDIOL
308.15	0.1013	88.55	0	88.69	0	1	1,4-BUTANEDIOL
313.15	0.1013	88.77	0	88.91	0.1	1	1,4-BUTANEDIOL
318.15	0.1013	89.05	0	89.18	0	1	1,4-BUTANEDIOL
298.15	0.1013	88.26	0	88	0.15	2	1,2,4-BUTANETRIOL
298.15	0.1013	87.84	0	87.68	0	1	1,2,3,4-BUTANETETROL

Muhammad et al. (2008)

298.15	0.1013	108.14	0	109.78	0.20	3	N-METHYLDIETHANOL AMINE
303.15	0.1013	108.68	0	110	0	1	N-METHYLDIETHANOL AMINE
313.15	0.1013	109.49	0	110.86	0.16	2	N-METHYLDIETHANOL AMINE
328.15	0.1013	110.94	0	112.03	0.04	1	N-METHYLDIETHANOL AMINE
333.15	0.1013	111.45	0	112.5	0	1	N-METHYLDIETHANOL AMINE

Cibulka et al. (2010)

298.15	0.10	84.92	0.04	84.73	0.23	1	CYCLOPENTANONE
298.15	0.10	99.51	0.05	99.63	0.07	2	CYCLOHEXANONE
298.15	0.10	114.00	0.07	113.8	0.3	1	CYCLOHEPTANONE CYCLOHEXANE-1.4- DIONE
298.15	0.10	92.40	0.17	92.8	0	1	

Li et al. (2007)

298.15	0.1013	76.7	0	77.07	0.1	1	2-METHYLAMINO- ETHANOL
--------	--------	------	---	-------	-----	---	---------------------------

Blanco et al. (2008)

298.15	0.1013	299.90	0.12	283.49	12.31	2	TETRABUTYLAMMONIUM BROMIDE
298.15	0.1013	173.29	0.09	114.19	29.34	2	TETRAETHYLAMMONIUM BROMIDE

Do databáze objemů bylo vloženo 34 nových látek. Bylo možno porovnat 293 z 548 údajů. Shoda je vesměs velmi dobrá, nejvíce se lišila data, která jsou starší než 20 let a byla získána méně přesnými technikami než pomocí nových typů vibračních hustoměrů.

Byla provedena literární rešerše, která vyústila ve výběr 48 odborných článků použitelných pro cíle bakalářské práce. Konkrétně se jednalo o články, referující originální data pro následující veličiny či veličiny příbuzné: hydratační Gibbsova energie, hydratační entalpie, hydratační tepelná kapacita a parciální molární objem. Práce se zabývala také veličinami příbuznými, zejména Henryho konstantou, limitním aktivitním koeficientem, rozpouštěcí entalpií, parciální molární tepelnou kapacitou. Získané zdroje byly prověřeny na přítomnost primárních experimentálních dat a tato data byla převedena na jednotný formát hydratačních veličin pomocí vhodných termodynamických vztahů. Tato data byla poté vložena do databází KCH. Každému vloženému údaji byla přiřazena experimentální chyba. Někteří autoři tyto chyby bohužel zcela vynechávají nebo neuvádí intervaly spolehlivosti. U přepočtů Gibbsovy energie, kde byly uvedeny experimentální chyby, byly přepočteny i příslušné chyby. Všechny cíle bakalářské práce byly splněny.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

Abu-Daabes, Malyuba A., a Akl M. Awwad. Volumetric and viscometric properties of aqueous solutions of N-(2-hydroxyethyl)morpholine at T = (293.15, 303.15, 313.15, 323.15, 333.15) K. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 40, květen 2008, 874-878.

Bald, Adam, a Zdzisław Kinart. Volumetric Properties of Some Aliphatic Mono- and Dicarboxylic Acids in Water at 298.15 K. *Journal of Solution Chemistry* 40, listopad 2010, 1-16.

Bayram, Edip, a Erol Ayranci. Effects of structural isomerism on solution behaviour of solutes: Apparent molar volumes and isentropic compression of catechol, resorcinol, and hydroquinone in aqueous solution at T = (283.15, 293.15, 298.15, 303.15, and 313.15) K. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 42, září 2010, 1168-1172.

Belandria, Veronica, Amir H. Mohammadi, a Dominique Richon. Volumetric properties of the (tetrahydrofuran + water) and (tetra-n-butyl ammonium bromide + water) systems: Experimental measurements and correlations. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 41, prosinec 2009, 1382-1386.

Bernazzani, Luca, Rita Carosi, Paolo Gianni, a Vincenzo Mollica. Heat Capacity of Micellization of Lithium Perfluoroalkanoates in Aqueous Solution. *Journal of Solution Chemistry* 38, srpen 2009, 1369-1379.

Blanco, Luis H., Yina P. Salamanca, a Edgar F. Vargas. Apparent Molal Volumes and Expansibilities of Tetraalkylammonium Bromides in Dilute Aqueous Solutions. *Journal of Chemical & Engineering Data* 53, prosinec 2008, 2770-2776.

Blanco, Luis H., Yina P. Salamanca, a Edgar F. Vargas. Enthalpies of solution in water of urotropine as function of concentration and temperature. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 104, leden 2011, 209-212.

Böhme, Alexander, Albrecht Paschke, Pavel Vrbka, Vladimír Dohnal, a Gerrit Schüürmann. Determination of Temperature-Dependent Henry's Law Constant of Four Oxygenated Solutes in Water Using Headspace Solid-Phase Microextraction Technique. *Journal of Chemical & Engineering Data* 53, prosinec 2008, 2873-2877.

Bolotov, Alexander, Ivan Cibulka, a Lubomír Hnědkovský. Partial Molar Volumes and Partial Molar Isentropic Compressions of γ -Butyrolactone and ϵ -Caprolactone at Infinite Dilution in Water at Temperatures (278.15 to 318.15) K and at Atmospheric Pressure. *Journal of Solution Chemistry* 40, duben 2011, 751-763.

Cibulka, Ivan, Lubomír Hnědkovský, a Josef Sedlbauer. Partial molar volumes of organic solutes in water. XX. Glycine(aq) and l-alanine(aq) at temperatures (298 to 443) K and at pressures up to 30 MPa. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 42, nor 2010, 198-207.

Cibulka, Ivan, Lukáš Šimurka, a Lubomír Hnědkovský . Partial Molar Volumes of Cyclic Ketones at Infinite Dilution in Water at Temperatures $T = (278 \text{ to } 373) \text{ K}$ and Low Pressure†. *Journal of Chemical & Engineering Data* 55, prosinec 2010, 5429-5434.

Coquelet, Christophe, Sylvain Laurens, a Dominique Richon. Measurement through a Gas Stripping Technique of Henry's Law Constants and Infinite Dilution Activity Coefficients of Propyl Mercaptan, Butyl Mercaptan, and Dimethyl Sulfide in Methyl-diethanolamine (1) + Water (2) with $w_1 = 0.25$ and 0.35 . *Journal of Chemical & Engineering Data* 53, listopad 2008, 2540-2543.

Della Gatta, G., Elena Badea, a Magdalena Saczuk. Thermodynamics of solvation of some linear and branched aliphatic aldehydes in water and heptane. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 42, jen 2010, 1204-1208.

Della Gatta, Giuseppe, Elena Badea, Małgorzata Józwiak, a Pompea Del Vecchio. Thermodynamics of Solvation of Urea and Some Monosubstituted N-Alkylureas in Water at 298.15 K . *Journal of Chemical & Engineering Data* 52, březen 2007, 419-425.

Dhondge, Sudhakar S., Chandrashekhar P. Pandhurnekar, a Dilip V. Parwate. Thermodynamic and optical studies of some ethylene glycol ethers in aqueous solutions at $T = 298.15 \text{ K}$. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 41, květen 2009, 577-585.

Dohnal, V., J. Novák a J. Matouš. CHEMICKÁ TERMODYNAMIKA II FÁZOVÉ ROVNOSTAVY. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 1997. ISBN 80-7080-275-8.

Dohnal, Vladimír, Pavel Vrbka, Karel Řehák, Alexander Böhme, a Albrecht Paschke. Activity coefficients and partial molar excess enthalpies at infinite dilution for four esters in water. *Fluid Phase Equilibria* 295, srpen 2010, 194-200.

Duman, Osman, a Erol Ayranci. Apparent molar volumes and isentropic compressibilities of benzyltrialkylammonium chlorides in water at $(293.15, 303.15, 313.15, 323.15, \text{ and } 333.15) \text{ K}$. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 41, srpen 2009, 911-915.

Dyke, Brendon P., a Gavin R. Hedwig. The partial molar volumes at $T = (288.15 \text{ to } 313.15) \text{ K}$, and the partial molar heat capacities and expansions at $T = 298.15 \text{ K}$ of cytidine, uridine, and adenosine in aqueous solution. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 40, červen 2008, 957-965.

Egorov, G. I., a D. M. Makarov. The compressibility of water-dimethyl sulfoxide mixtures over the temperature and pressure ranges $278\text{--}323.15 \text{ K}$ and $1\text{--}1000 \text{ bar}$. *Russian Journal of Physical Chemistry A* 83, prosinec 2009, 2058-2065.

Egorov, G. I., D. M. Makarov, a A. M. Kolker. Volumetric properties of the water-ethylene glycol mixtures in the temperature range $278\text{--}333.15 \text{ K}$ at atmospheric pressure. *Russian Journal of General Chemistry* 80, září 2010, 1577-1585.

Egorov, Gennadiy I., a Dmitriy M. Makarov. Densities and volume properties of (water + tert-butanol) over the temperature range of (274.15 to 348.15) K at pressure of 0.1 MPa. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 43, březn 2011, 430-441.

Fucaloro, A. F. et al. Partial Molar Volumes of Uracil, Thymine, Adenine in Water and of Adenine in Aqueous Solutions of Uracil and Thymine. *Journal of Solution Chemistry* 37, červenec 2008, 1289-1304.

Gupta, RR, a M Singh. Apparent molar volumes of oxalic acid in water and in aqueous solutions of fructose at 293.15, 303.15, 313.15 and 323.15K. *Indian journal of chemistry section a-inorganic bio-inorganic physical* 46, březn 2007, 455-458.

Hedwig, Gavin R. The Partial Molar Heat Capacities and Expansions of Inosine, 2'-Deoxyinosine and 2'-Deoxyguanosine in Aqueous Solution at 298.15 K. *Journal of Solution Chemistry* 38, srpen 2009, 1315-1331.

Hertel, Marcus O., a Karl Sommer. Limiting Separation Factors and Limiting Activity Coefficients for 2-Furfural, γ -Nonalactone, Benzaldehyde, and Linalool in Water at 100 °C. *Journal of Chemical & Engineering Data* 51, červenec 2006, 1283-1285.

Hertel, Marcus O., Hans Scheuren, Karl Sommer, a Karl Glas. Limiting Separation Factors and Limiting Activity Coefficients for Hexanal, 2-Methylbutanal, 3-Methylbutanal, and Dimethylsulfide in Water at (98.1 to 99.0) °C. *Journal of Chemical & Engineering Data* 52, leden 2007, 148-150.

Hwang, In-Chan, Hae-yeon Kwak, a So-Jin Park. Determination and prediction of Kow and dimensionless Henry's constant (H) for 6 ether compounds at several temperatures. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 16, červenec 2010, 629-633.

Ivanov, Evgeniy V. Volumetric Properties of Aqueous Solutions of Tetramethyl-bis-urea between 278.15 and 338.15 K at Atmospheric Pressure. *Journal of Solution Chemistry* 39, prosinec 2009, 343-354.

Ivanov, Evgeniy V., a Andrey V. Kustov. Volumetric properties of (water + hexamethylphosphoric triamide) from (288.15 to 308.15) K. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 42, září 2010, 1087-1093.

Ivanov, Evgeniy V., a Vladimir K. Abrosimov. D2O — H2O Solvent Isotope Effects on the Apparent Molar Volumes of Tetramethyl-bis-urea (Mebicarium) Solutions. *Journal of Solution Chemistry* 36, únor 2007, 313-325.

Jamal, MA, a M Iqbal. Volumetric Studies of Some Amino Acids in Aqueous Medium at Different Temperatures. *Journal of the chemical society of Pakistan* 33, únor 2011, 71-74.

Keswani, Neelam, Karunakar Kar, a Nand Kishore. Thermodynamic properties of aqueous 4-hydroxyproline at different temperatures. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 42, květen 2010, 597-604.

Kharat, Sanjeevan J. Density and Viscosity Studies of Aqueous Solutions of Cesium Trifluoroacetate at Different Temperatures. *Journal of Chemical & Engineering Data* 53, červen 2008, 1292-1294.

Klofutar, C, J Horvat, a D Rudan-Tasic. Apparent molar volume and apparent molar expansibility of tetraethyl-, tetra-n-propyl-, tetra-n-butyl-, and tetra-n-pentylammonium cyclohexylsulfamates in aqueous solution. *Acta chimica slovenica* 54, 2007, 460-468.

Korolev, V. P., D. V. Batov, N. L. Smirnova, a A. V. Kustov. Amino acids in aqueous solution. Effect of molecular structure and temperature on thermodynamics of dissolution. *Russian Chemical Bulletin* 56, duben 2007, 739-742.

Li, Juelin, Mayur Mundhwa, Paitoon Tontiwachwuthikul, a Amr Henni. Volumetric Properties, Viscosities, and Refractive Indices for Aqueous 2-(Methylamino)ethanol Solutions from (298.15 to 343.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data* 52, březen 2007, 560-565.

Liu, Jin L., Andrew W. Hakin, a Gavin R. Hedwig. Partial molar volumes and heat capacities of the N-acetyl amide derivatives of the amino acids asparagine, glutamine, tyrosine, and lysine monohydrochloride in aqueous solution at temperatures from T = 288.15 K to T = 328.15 K. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 38, prosinec 2006, 1640-1650.

Meloun M., Militký J. Statistické zpracování experimentálních dat, 2. vyd. EAST PUBLISHING, Praha 1998. ISBN: 80-7219-003-2.

Muhammad, Ayyaz, Mohamed I. Abdul Mutalib, Thanabalan Murugesan, a Amir Shafeeq. Density and Excess Properties of Aqueous N-Methyldiethanolamine Solutions from (298.15 to 338.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data* 53, 2008, 2217-2221.

Nielsen, Troels Bach et al. Thermodynamic investigations of methyl tert-butyl ether and water mixtures. *Physical Chemistry Chemical Physics* 13, 2011, 1182.

Parmar, M, a S Attri. A comparative study of partial molar volumes of some common, tetra-alkyl ammonium and multivalent electrolytes in aqueous and binary aqueous solutions of urea. *Journal of Molecular Liquids* 136, listopad 2007, 38-43.

Pitkänen, Ilkka, Jaana Suuronen, a Juha Nurmi. Partial Molar Volume, Ionization, Viscosity and Structure of Glycine Betaine in Aqueous Solutions. *Journal of Solution Chemistry* 39, listopad 2010, 1609-1626.

Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P. The Properties of Gases and Liquids, 5. Ed., McGraw-Hill, New York, 2001. ISBN: 0-07-011682-2.

Pourtier, Emilie, Karine Ballerat-Busserolles, a Vladimir Majer. Standard Molar Volumes and Heat Capacities of Aqueous Solutions of Trifluoromethanesulfonic

Acid at Temperatures up to 573 K and Pressures to 30 MPa. *Journal of Solution Chemistry* 38, březen 2009, 601-618.

Romero, Carmen M., a John C. Cadena. Effect of Temperature on the Volumetric Properties of α,ω -Amino Acids in Dilute Aqueous Solutions. *Journal of Solution Chemistry* 39, říjen 2010, 1474-1483.

Romero, Carmen, José Lozano, a Gloria Giraldo. Effect of temperature on partial molar volumes and viscosities of dilute aqueous solutions of 1-butanol, 1,2-butanediol, 1,4-butanediol, 1,2,4-butanetriol, and butanetetrol. *Physics and Chemistry of Liquids* 46, únor 2008, 78-85.

Sadeghi, Rahmat, a Fatemeh Ziamajidi. Thermodynamic Properties of Tripotassium Citrate in Water and in Aqueous Solutions of Polypropylene Oxide 400 over a Range of Temperatures. *Journal of Chemical & Engineering Data* 52, 2007, 1753-1759.

Sedláčková. Liberec, 2005. Diplomová práce. TUL.

Slavík, M.. Modelování standardních termodynamických vlastností vodných roztoků kyslíkatých organických sloučenin za vysokých teplot a tlaků. Liberec, 2006. Disertační práce. TUL.

Staudinger J., Roberts P. A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions. *Chemosphere*, 44, 2001, 561-576.

Šedlbauer, J.. Modelování termodynamických vlastností vodných roztoků organických sloučenin v širokém rozmezí teplot a tlak. Brno, 2009. ISBN 978-80-214-4024-1.

Tomé, Luciana I.N. et al. Solvation enthalpy and the thermodynamics of hydration of trans-cyclohexyl-1,4-diamine and cis-cyclohexyl-1,2-diamine. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 39, jen 2007, 1357-1362.

Yeow, Y. Leong, Jian Ge, Yee-Kwong Leong, a Ash Khan. Investigating the Properties of Aqueous Monoisopropanolamine Using Density Data from 283.15K to 353.15 K. *International Journal of Thermophysics* 30, leden 2009, 448-463.

Yuan, Quan, Zhi-Fen Li, a Bao-Huai Wang. Partial molar volumes of l-alanine, dl-serine, dl-threonine, l-histidine, glycine, and glycylglycine in water, NaCl, and DMSO aqueous solutions at $T = 298.15$ K. *The Journal of Chemical Thermodynamics* 38, leden 2006, 20-33.

PŘÍLOHA A

V následující tabulce jsou uvedeny všechny data, která jsem shromáždila. V prvním sloupci je uvedené pořadí článku, které koresponduje s rešeršní tabulkou. V druhém sloupci je uvedena teplota v K . Třetí sloupec udává tlaky v MPa . Ve sloupci hodnota jsou uvedena již cílová data, která byla vložena do databáze. Sloupec s názvem chyba obsahuje informaci o experimentální chybě. Další sloupec určuje o jakou látku se jedná. Poslední sloupec má formu reference, která se skládá z iniciál autorů. V závorce je uveden rok, kdy byl příslušný článek publikován.

Tabulka 26: Příloha A

	T [K]	P [MPa]	Hodnota	Chyba	Látka	Autor
1			V [cm ³ /mol]			
	298.15	0.1013	36.90	0	FORMIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	52.22	0	ACETIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	67.82	0	PROPIONIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	84.38	0	BUTYRIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	100.44	0	VALERIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	115.83	0	HEXANOIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	53.36	0	OXALIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	68.11	0	MALONIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	83.64	0	SUCCINIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	98.99	0	GLUTARIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	115.87	0	ADIPIC-ACID	AB+ZK(10)
	298.15	0.1013	131.81	0	PIMELIC-ACID	AB+ZK(10)
2			V [cm ³ /mol]			
	278.15	0.1013	155.22	0.03	TETRAMETHYLUREA	EI(09)
	338.15	0.1013	163.35	0.10	TETRAMETHYLUREA	EI(09)
3			V [cm ³ /mol]			
	288.15	0.1013	157.02	0.05	TETRAMETHYLUREA	EI+VA(07)
	298.15	0.1013	158.83	0.065	TETRAMETHYLUREA	EI+VA(07)
	308.15	0.1013	160.29	0.05	TETRAMETHYLUREA	EI+VA(07)
	318.15	0.1013	161.34	0.02	TETRAMETHYLUREA	EI+VA(07)
4			V [cm ³ /mol]			
	298.19	0.10	75.4	0.2	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)
	323.14	0.10	77.8	0.2	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)
	373.17	1.11	79.5	0.2	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)
	473.38	2.58	77.8	0.7	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)
	523.27	5.25	62.0	1.5	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)
	573.15	10.6	7.4	2.4	TRIFLUOROMETHANESULFONIC- ACID	EP+KB+VM(09)

				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
298.07	31.0	74.6	0.5	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
323.15	27.5	76.8	1.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
373.14	30.5	79.2	1.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
473.39	27.5	80.4	2.6	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
523.04	27.7	68.4	2.9	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
573.89	28.0	34.2	2.4	ACID	EP+KB+VM(09)
		C _p			
		[J/K*MOL]			
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
322.70	1.9	183	3.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
374.08	1.37	162	3.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
423.98	10.48	113	5.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
473.29	2.9	4.3	1.8	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
524.19	10.49	-235	5.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
573.85	10.50	-1213	5.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
322.85	28.10	192	2.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
374.22	28.35	169	6.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
424.00	28.62	132	8.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
473.21	28.67	25.5	6.6	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
523.80	28.46	-193	18.0	ACID	EP+KB+VM(09)
				TRIFLUOROMETHANESULFONIC-	
573.85	27.7	-594	8.0	ACID	EP+KB+VM(09)
		C _p			
5		[J/K*MOL]			
				RIBOSE	GH(09)
298.15	0.1013	283.5	0.9		
				DEOXYRIBOSE	GH(09)
298.15	0.1013	279.2	0.5		
				INOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	388.4	1.0		
				DEOXYINOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	368.5	3.5		
				DEOXYGUANOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	397.1	7.7		

V [cm ³ /mol]					
298.15	0.1013	95.29	0.02	D-RIBOSE	GH(09)
298.15	0.1013	94.62	0.02	2-DEOXYRIBOSE	GH(09)
288.15	0.1013	163.86	0.07	INOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	166.10	0.05	INOSINE	GH(09)
303.15	0.1013	166.89	0.07	INOSINE	GH(09)
313.15	0.1013	168.53	0.08	INOSINE	GH(09)
288.15	0.1013	161.8	0.10	2-DEOXYINOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	163.68	0.07	2-DEOXYINOSINE	GH(09)
303.15	0.1013	164.48	0.06	2-DEOXYINOSINE	GH(09)
313.15	0.1013	166.13	0.04	2-DEOXYINOSINE	GH(09)
288.15	0.1013	166.77	0.16	2-DEOXYGUANOSINE	GH(09)
298.15	0.1013	169.26	0.11	2-DEOXYGUANOSINE	GH(09)
303.15	0.1013	170.04	0.12	2-DEOXYGUANOSINE	GH(09)
313.15	0.1013	171.63	0.22	2-DEOXYGUANOSINE	GH(09)
6					
V [cm ³ /mol]					
288.15	0.1013	70.66	0.14	URACIL	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
293.15	0.1013	71.57	0.11	URACIL	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
298.15	0.1013	72.02	0.10	URACIL	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
288.15	0.1013	87.78	0.18	THYMINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
293.15	0.1013	88.40	0.15	THYMINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
298.15	0.1013	89.14	0.16	THYMINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
288.15	0.1013	88.59	0.22	ADENINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
291.30	0.1013	88.86	0.18	ADENINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
293.15	0.1013	89.34	0.24	ADENINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
295.30	0.1013	89.68	0.17	ADENINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
298.15	0.1013	90.02	0.19	ADENINE	AF+KD+GF+KI+DJ+MM(08)
7					
V [cm ³ /mol]					
278.15	0.1013	71.44	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
283.15	0.1013	72.09	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
288.15	0.1013	72.69	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
293.15	0.1013	73.24	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)

	298.15	0.1013	73.77	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	308.15	0.1013	74.79	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	318.15	0.1013	75.80	0.03	γ -BUTYROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	278.15	0.1013	101.84	0.12	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	283.15	0.1013	102.56	0.12	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	288.15	0.1013	103.19	0.12	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	293.15	0.1013	103.84	0.13	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	298.15	0.1013	104.42	0.14	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	308.15	0.1013	105.73	0.11	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
	318.15	0.1013	106.94	0.11	ϵ -CAPROLACTONE	AB+IC+LH(11)
8	V [cm ³ /mol]					
	278.15	0.1013	96.52	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	283.15	0.1013	97.43	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	288.15	0.1013	97.90	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	293.15	0.1013	98.36	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	298.15	0.1013	98.66	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	303.15	0.1013	99.07	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	310.15	0.1013	99.13	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
	318.15	0.1013	99.96	0	TRIMETHYLGLYCIN	IP+JS+JN(10)
9	C _p [J/K*MOL]					
	298.15	0.1013	735	0	PERFLUOROHXANOATE	LB+RC+PG+VM(09)
	298.15	0.1013	848	0	PERFLUOROHEPTANOATE	LB+RC+PG+VM(09)
	298.15	0.1013	1002	0	PERFLUOROOCTANOATE	LB+RC+PG+VM(09)
	298.15	0.1013	937	0	PERFLUOROOCTANOATE	LB+RC+PG+VM(09)
	298.15	0.1013	1130	0	PERFLUORONONANOATE	LB+RC+PG+VM(09)
10	V [cm ³ /mol]					
	293.15	0.1013	57.94	0	3-AMINOPROPANOIC-ACID	CR+JC(10)
	298.15	0.1013	58.30	0	3-AMINOPROPANOIC-ACID	CR+JC(10)
	303.15	0.1013	58.54	0	3-AMINOPROPANOIC-ACID	CR+JC(10)
	308.15	0.1013	58.72	0	3-AMINOPROPANOIC-ACID	CR+JC(10)
	293.15	0.1013	72.27	0	4-AMINOBUTANOIC-ACID	CR+JC(10)

298.15	0.1013	72.52	0	4-AMINOBUTANOIC-ACID	CR+JC(10)
303.15	0.1013	72.72	0	4-AMINOBUTANOIC-ACID	CR+JC(10)
308.15	0.1013	72.89	0	4-AMINOBUTANOIC-ACID	CR+JC(10)
293.15	0.1013	86.85	0	5-AMINOPENTANOIC-ACID	CR+JC(10)
298.15	0.1013	87.27	0	5-AMINOPENTANOIC-ACID	CR+JC(10)
303.15	0.1013	87.62	0	5-AMINOPENTANOIC-ACID	CR+JC(10)
308.15	0.1013	87.73	0	5-AMINOPENTANOIC-ACID	CR+JC(10)
293.15	0.1013	104.37	0	6-AMINOHEXANOIC-ACID	CR+JC(10)
298.15	0.1013	104.53	0	6-AMINOHEXANOIC-ACID	CR+JC(10)
303.15	0.1013	104.95	0	6-AMINOHEXANOIC-ACID	CR+JC(10)
308.15	0.1013	105.15	0	6-AMINOHEXANOIC-ACID	CR+JC(10)

11

G[kJ/MOL]

273.15	0.1013	-10.017	0.0703	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
283.15	0.1013	-8.765	0.0370	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
293.15	0.1013	-7.548	0.0206	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
298.15	0.1013	-6.962	0.0157	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
303.15	0.1013	-6.391	0.0122	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
313.15	0.1013	-5.290	0.0076	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
323.15	0.1013	-4.245	0.0050	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
333.15	0.1013	-3.254	0.0034	DIMETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
273.15	0.1013	-9.885	0.0857	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
283.15	0.1013	-8.182	0.0374	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
293.15	0.1013	-6.559	0.0178	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
298.15	0.1013	-5.791	0.0127	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
303.15	0.1013	-5.050	0.0093	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
313.15	0.1013	-3.649	0.0052	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
323.15	0.1013	-2.354	0.0032	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
333.15	0.1013	-1.161	0.0021	DIETHYL CARBONATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
273.15	0.1013	-5.142	0.0089	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
283.15	0.1013	-3.754	0.0047	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
293.15	0.1013	-2.433	0.0027	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
298.15	0.1013	-1.808	0.0021	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
303.15	0.1013	-1.206	0.0017	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)

	313.15	0.1013	-0.068	0.0011	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	323.15	0.1013	0.983	0.0008	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	333.15	0.1013	1.950	0.0006	VINYLACETATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	273.15	0.1013	-6.643	0.0176	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	283.15	0.1013	-5.078	0.0085	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	293.15	0.1013	-3.586	0.0044	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	298.15	0.1013	-2.879	0.0033	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	303.15	0.1013	-2.197	0.0025	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	313.15	0.1013	-0.907	0.0015	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	323.15	0.1013	0.287	0.0010	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
	333.15	0.1013	1.388	0.0007	METHYL-METHACRYLATE	VD+PV+KR+AB+AP(10)
12	V [cm ³ /mol]					
	283.15	0.1013	74.7742	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	288.15	0.1013	74.9729	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	293.15	0.1013	75.1599	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	298.15	0.1013	75.3609	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	303.15	0.1013	75.5658	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	308.15	0.1013	75.8034	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	313.15	0.1013	76.0291	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	318.15	0.1013	76.2718	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	323.15	0.1013	76.5238	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	328.15	0.1013	76.7861	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	333.15	0.1013	77.0626	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	338.15	0.1013	77.3537	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	343.15	0.1013	77.6420	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	348.15	0.1013	77.9409	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
	353.15	0.1013	78.2393	0	1-AMINOPROPAN-2-OL	YY+JG+YL+AK(09)
13	H[kJ/MOL]					
	278.15	0.1013	-99.65	0.05	HEXAMETHYLENETETRAMINE	LB+YS+EV(11)
	288.15	0.1013	-97.48	0.07	HEXAMETHYLENETETRAMINE	LB+YS+EV(11)
	298.15	0.1013	-96.30	0.17	HEXAMETHYLENETETRAMINE	LB+YS+EV(11)
	308.15	0.1013	-95.57	0.06	HEXAMETHYLENETETRAMINE	LB+YS+EV(11)

14	H[kJ/MOL]					
	298.15	0.1013	-122.1	0.01	GLYCINE	VK+DB+NS+AK(07)
	298.15	0.1013	-136.9	0.01	ALANINE	VK+DB+NS+AK(07)
	298.15	0.1013	-144.7	0.015	PHENYLALANINE	VK+DB+NS+AK(07)
	298.15	0.1013	-142.7	0.025	HISTIDINE	VK+DB+NS+AK(07)
15	V [cm ³ /mol]					
	274.15	0.1013	53.53	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	275.15	0.1013	53.58	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	276.15	0.1013	53.63	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	277.15	0.1013	53.69	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	278.15	0.1013	53.74	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	279.15	0.1013	53.76	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	280.15	0.1013	53.82	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	281.15	0.1013	53.87	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	282.15	0.1013	53.92	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	283.15	0.1013	53.93	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	288.15	0.1013	54.16	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	298.15	0.1013	54.58	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	308.15	0.1013	54.94	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	323.15	0.1013	55.51	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
	333.15	0.1013	55.94	0	ETHYLENE GLYCOL	GE+DM+AK(10)
16	V [cm ³ /mol]					
	278.15	10.0	67.39	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	278.15	25.0	67.34	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	278.15	50.0	67.27	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	278.15	75.0	67.22	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	278.15	100.0	67.16	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	288.15	10.0	68.08	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	288.15	25.0	68.03	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	288.15	50.0	67.96	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	288.15	75.0	67.89	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	288.15	100.0	67.80	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)

	298.15	10.0	68.65	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	298.15	25.0	68.52	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	298.15	50.0	68.29	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	298.15	75.0	68.01	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	298.15	100.0	67.71	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	308.15	10.0	69.21	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	308.15	25.0	69.07	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	308.15	50.0	68.88	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	308.15	75.0	68.67	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	308.15	100.0	68.49	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	323.15	10.0	70.01	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	323.15	25.0	69.73	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	323.15	50.0	69.33	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	323.15	75.0	68.94	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
	323.15	100.0	68.58	0	DIMETHYLSULFOXIDE	GE+DM(09)
17			V [cm ³ /mol]			
					N-(2-	
	293.15	0.1013	114.86	0	HYDROXYETHYL(MORPHOLINE)	MA+AA(08)
					N-(2-	
	303.15	0.1013	116.72	0	HYDROXYETHYL(MORPHOLINE)	MA+AA(08)
					N-(2-	
	313.15	0.1013	118.32	0	HYDROXYETHYL(MORPHOLINE)	MA+AA(08)
					N-(2-	
	323.15	0.1013	119.67	0	HYDROXYETHYL(MORPHOLINE)	MA+AA(08)
					N-(2-	
	333.15	0.1013	120.77	0	HYDROXYETHYL(MORPHOLINE)	MA+AA(08)
18			V [cm ³ /mol]			
	283.15	0.1013	85.40	0.03	1,2-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	293.15	0.1013	86.43	0.02	1,2-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	298.15	0.1013	86.91	0.02	1,2-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	303.15	0.1013	87.46	0.03	1,2-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	313.15	0.1013	88.41	0.05	1,2-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	283.15	0.1013	88.10	0.08	1,3-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	293.15	0.1013	88.84	0.04	1,3-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	298.15	0.1013	89.09	0.06	1,3-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)

	303.15	0.1013	89.51	0.07	1,3-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	313.15	0.1013	90.67	0.12	1,3-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	283.15	0.1013	87.14	0.03	1,4-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	293.15	0.1013	88.26	0.07	1,4-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	298.15	0.1013	88.41	0.06	1,4-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	303.15	0.1013	89.05	0.07	1,4-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
	313.15	0.1013	89.57	0.08	1,4-DIHYDROXYBENZENE	EB+EA(10)
19	V [cm ³ /mol]					
	293.15	0.1013	76.82	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	298.15	0.1013	72.03	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	303.15	0.1013	71.46	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	308.15	0.1013	70.77	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	313.15	0.1013	69.92	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	318.15	0.1013	68.94	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	323.15	0.1013	67.87	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	328.15	0.1013	66.67	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
	333.15	0.1013	65.37	0	TETRAHYDROFURAN	VB+AM+DR(09)
20	V [cm ³ /mol]					
	298.16	0.35	43.35	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	318.16	0.28	44.24	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	338.14	0.58	44.67	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	358.16	0.65	44.75	0.14	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	378.15	2.17	44.56	0.15	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	408.17	2.18	43.63	0.16	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	443.16	2.12	41.30	0.21	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	298.16	15.05	43.73	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	318.16	15.05	44.59	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	338.14	15.99	44.99	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	358.16	15.54	45.08	0.14	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	378.15	16.59	44.96	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	408.18	16.98	44.25	0.15	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
	298.15	30.24	44.19	0.12	GLYCINE	IC+LH+JS(10)

318.16	30.24	44.97	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
338.14	30.20	45.37	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
358.16	29.91	45.43	0.13	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
378.15	30.15	45.36	0.14	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
408.17	31.17	44.80	0.15	GLYCINE	IC+LH+JS(10)
298.16	0.34	60.60	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
318.16	0.28	61.40	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
338.14	0.58	61.91	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
358.16	0.63	62.15	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
378.15	2.18	62.28	0.13	ALANINE	IC+LH+JS(10)
408.17	2.17	62.04	0.14	ALANINE	IC+LH+JS(10)
443.16	2.11	60.84	0.17	ALANINE	IC+LH+JS(10)
298.16	15.09	60.96	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
318.16	16.01	61.69	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
338.14	15.99	62.15	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
358.16	15.54	62.40	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
378.15	16.59	62.51	0.13	ALANINE	IC+LH+JS(10)
408.18	16.98	62.43	0.14	ALANINE	IC+LH+JS(10)
298.15	30.26	61.35	0.11	ALANINE	IC+LH+JS(10)
318.16	30.25	62.00	0.11	ALANINE	IC+LH+JS(10)
338.14	30.21	62.42	0.11	ALANINE	IC+LH+JS(10)
358.16	30.10	62.60	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
378.15	30.16	62.75	0.12	ALANINE	IC+LH+JS(10)
408.17	30.17	62.81	0.14	ALANINE	IC+LH+JS(10)

21		H[kJ/MOL]				
	298.15	0.1013	-41.0	0.45	PROPANAL	GG+EB+MS(10)
	298.15	0.1013	-43.6	1.0	BUTANAL	GG+EB+MS(10)
	298.15	0.1013	-39.3	0.75	2-METHYLPROPANAL	GG+EB+MS(10)
	298.15	0.1013	-47.8	0.8	PENTANAL	GG+EB+MS(10)
	298.15	0.1013	-44.2	0	2,2-DIMETHYLPROPANAL	GG+EB+MS(10)

22	V [cm ³ /mol]					
					ETHYLENE-GLYCOL-	
298.15	0.1013	74.66	0		MONOMETHYL-ETHER	SD+CP+DP(09)
					ETHYLENE-GLYCOL-	
298.15	0.1013	90.89	0		MONOETHYL-ETHER	SD+CP+DP(09)
					DIETHYLENE-GLYCOL-	
298.15	0.1013	112.68	0		MONOMETHYL-ETHER	SD+CP+DP(09)
					DIETHYLENE-GLYCOL-	
298.15	0.1013	128.20	0		MONOETHYL-ETHER	SD+CP+DP(09)
23	V [cm ³ /mol]					
					BENZYLTRIMETHYLAMMONIUM-	
293.15	0.1013	167.8	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIMETHYLAMMONIUM-	
303.15	0.1013	169.3	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIMETHYLAMMONIUM-	
313.15	0.1013	170.6	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIMETHYLAMMONIUM-	
323.15	0.1013	171.9	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIMETHYLAMMONIUM-	
333.15	0.1013	173.2	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIETHYLAMMONIUM-	
293.15	0.1013	211.2	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIETHYLAMMONIUM-	
303.15	0.1013	212.9	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIETHYLAMMONIUM-	
313.15	0.1013	214.5	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIETHYLAMMONIUM-	
323.15	0.1013	216.1	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIETHYLAMMONIUM-	
333.15	0.1013	217.7	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIBUTYLAMMONIUM-	
293.15	0.1013	305.6	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIBUTYLAMMONIUM-	
303.15	0.1013	308.4	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIBUTYLAMMONIUM-	
313.15	0.1013	311.4	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIBUTYLAMMONIUM-	
323.15	0.1013	314.4	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
					BENZYLTRIBUTYLAMMONIUM-	
333.15	0.1013	317.6	0		CHLORIDE	OD+EA(09)
24	V [cm ³ /mol]					
288.15	0.1013	151.82	0.03		CYTIDINE	BD+GH(08)
298.15	0.1013	153.88	0.02		CYTIDINE	BD+GH(08)
303.15	0.1013	154.75	0.03		CYTIDINE	BD+GH(08)

	313.15	0.1013	156.25	0.03	CYTIDINE	BD+GH(08)
	288.15	0.1013	150.58	0.09	URIDINE	BD+GH(08)
	298.15	0.1013	152.74	0.02	URIDINE	BD+GH(08)
	303.15	0.1013	153.58	0.02	URIDINE	BD+GH(08)
	313.15	0.1013	155.30	0.02	URIDINE	BD+GH(08)
	288.15	0.1013	169.26	0.13	ADENOSINE	BD+GH(08)
	298.15	0.1013	171.34	0.18	ADENOSINE	BD+GH(08)
	303.15	0.1013	172.39	0.13	ADENOSINE	BD+GH(08)
	313.15	0.1013	174.42	0.17	ADENOSINE	BD+GH(08)
	C _p [J/K*MOL]					
	298.15	0.1013	397.3	2.1	CYTIDINE	BD+GH(08)
	298.15	0.1013	387.7	1.8	URIDINE	BD+GH(08)
	298.15	0.1013	488.1	2.4	ADENOSINE	BD+GH(08)
25	V [cm ³ /mol]					
	274.15	0.1	88.10	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	275.15	0.1	88.08	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	276.15	0.1	87.95	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	277.15	0.1	87.92	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	278.15	0.1	87.89	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	279.15	0.1	87.85	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	280.15	0.1	87.87	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	281.15	0.1	87.83	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	282.15	0.1	87.83	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	283.15	0.1	87.80	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	288.15	0.1	87.61	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	298.15	0.1	87.72	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	308.15	0.1	88.22	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	323.15	0.1	88.83	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	333.15	0.1	89.58	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)
	348.15	0.1	90.42	0	2-METHYL-2-PROPANOL	GE+DM(11)

26	V [cm ³ /mol]				HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
	288.15	0.1013	163.8	0.1	HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
	293.15	0.1013	165.1	0.1	HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
	298.15	0.1013	166.3	0.1	HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
	303.15	0.1013	167.5	0.1	HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
	308.15	0.1013	168.8	0.1	HEXAMETHYLPHOSPHORIC- TRIAMIDE	EI+AK(10)
27	C _p [J/K*MOL]					
	298.15	0.1013	143	3	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	303.15	0.1013	156	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	308.15	0.1013	168	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	313.15	0.1013	179	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	318.15	0.1013	188	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	323.15	0.1013	196	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	328.15	0.1013	203	2	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	298.15	0.1013	184	0.5	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	303.15	0.1013	191	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	308.15	0.1013	196	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	313.15	0.1013	201	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	318.15	0.1013	206	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	323.15	0.1013	210	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	328.15	0.1013	214	0.3	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	V [cm ³ /mol]					
	288.15	0.1013	83.13	0.07	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	293.15	0.1013	83.72	0.04	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	298.15	0.1013	84.20	0.05	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	303.15	0.1013	84.60	0.05	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	308.15	0.1013	84.89	0.04	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	313.15	0.1013	85.09	0.07	4-HYDROXYPROLINE	NK+KK+NK(10)
	288.15	0.1013	82.52	0.02	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	293.15	0.1013	82.89	0.02	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	298.15	0.1013	83.26	0.01	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)

	303.15	0.1013	83.62	0.01	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	308.15	0.1013	83.99	0.02	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
	313.15	0.1013	84.36	0.02	L-PROLINE	NK+KK+NK(10)
28			V [cm ³ /mol]			
	288.15	0.1013	124.10	0.08	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	125.47	0.08	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	127.37	0.11	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	128.87	0.05	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	140.62	0.16	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	142.09	0.08	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	144.05	0.12	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	145.60	0.08	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	171.93	0.19	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	173.29	0.15	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	176.25	0.14	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	178.51	0.24	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	171.94	0.04	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	173.74	0.03	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	175.18	0.04	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	176.93	0.06	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
			C _p [J/K*MOL]			
	288.15	0.1013	306.9	2.2	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	331.7	1.4	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	356.8	2.3	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	377.8	2.2	N-ACETYLASPARAGINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	353.9	2.2	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	376.6	1.3	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	409.4	1.3	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	430.8	0.9	N-ACETYLGLUTAMINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	504.0	2.7	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	516.4	2.5	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)

	313.15	0.1013	543.5	1.6	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	553.6	2.2	N-ACETYLTYROSINAMIDE	JL+AH+GH(06)
	288.15	0.1013	333.4	1.9	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	298.15	0.1013	374.3	0.4	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	313.15	0.1013	403.9	2.7	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
	328.15	0.1013	421.7	1.0	N-ACETYLLYSINAMIDE- MONOHYDROCHLORIDE	JL+AH+GH(06)
29			H[kJ/MOL]		TRANS-CYCLOHEXYL-1,4- DIAMINE	LT+ AL+RE+MT+JC+ME(07)
	298.15	0.1013	-114.0	0		
	298.15	0.1013	-94.1	0	CIS-CYCLOHEXYL-1,2-DIAMINE	LT+ AL+RE+MT+JC+ME(07)
30			V [cm ³ /mol]			
	298.15	0.1013	43.01	0.04	GLYCINE	QY+ZL+BW(06)
	298.15	0.1013	60.49	0.05	ALANINE	QY+ZL+BW(06)
	298.15	0.1013	98.96	0.05	HISTINE	QY+ZL+BW(06)
	298.15	0.1013	76.88	0.05	THREONINE	QY+ZL+BW(06)
	298.15	0.1013	76.36	0.02	GLYCYL-GLYCINE	QY+ZL+BW(06)
	298.15	0.1013	60.06	0.04	SERINE	QY+ZL+BW(06)
31			V [cm ³ /mol]			
	283.15	0.1013	58.453	0.060	L-ALANINE	MJ+MI(11)
	293.15	0.1013	59.909	0.016	L-ALANINE	MJ+MI(11)
	303.15	0.1013	60.726	0.027	L-ALANINE	MJ+MI(11)
	313.15	0.1013	62.313	0.173	L-ALANINE	MJ+MI(11)
	283.15	0.1013	120.312	0.017	L-ARGININE	MJ+MI(11)
	293.15	0.1013	123.365	0.176	L-ARGININE	MJ+MI(11)
	303.15	0.1013	125.413	0.003	L-ARGININE	MJ+MI(11)
	313.15	0.1013	125.907	0.153	L-ARGININE	MJ+MI(11)
	283.15	0.1013	89.641	0.003	L-ASPARAGINE	MJ+MI(11)
	293.15	0.1013	93.718	0.386	L-ASPARAGINE	MJ+MI(11)
	303.15	0.1013	94.710	0.088	L-ASPARAGINE	MJ+MI(11)
	313.15	0.1013	99.627	0.027	L-ASPARAGINE	MJ+MI(11)

283.15	0.1013	86.453	0.019	L-GLUTAMIC-ACID	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	88.402	0.035	L-GLUTAMIC-ACID	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	89.116	0.008	L-GLUTAMIC-ACID	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	91.831	0.026	L-GLUTAMIC-ACID	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	41.003	0.075	GLYCINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	41.898	0.039	GLYCINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	43.282	0.003	GLYCINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	45.211	0.061	GLYCINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	96.250	0.002	L-HISTIDINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	97.813	0.067	L-HISTIDINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	98.273	0.01	L-HISTIDINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	102.339	0.033	L-HISTIDINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	105.923	0.010	L-LEUCINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	107.643	0.029	L-LEUCINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	107.822	0.005	L-LEUCINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	109.627	0.027	L-LEUCINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	121.345	0.012	L-LYSINE-HCL	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	124.214	0.082	L-LYSINE-HCL	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	125.037	0.016	L-LYSINE-HCL	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	127.879	0.034	L-LYSINE-HCL	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	80.986	0.017	L-PROLINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	82.498	0.094	L-PROLINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	82.606	0.006	L-PROLINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	84.938	0.062	L-PROLINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	60.289	0.047	L-SERINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	60.348	0.068	L-SERINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	60.504	0.007	L-SERINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	62.957	0.144	L-SERINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	75.450	1.000	DL-THREONINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	77.000	0.021	DL-THREONINE	MJ+MI(11)
303.15	0.1013	77.413	0.046	DL-THREONINE	MJ+MI(11)
313.15	0.1013	79.671	0.087	DL-THREONINE	MJ+MI(11)
283.15	0.1013	89.137	0.002	L-VALINE	MJ+MI(11)
293.15	0.1013	90.273	0.031	L-VALINE	MJ+MI(11)

	303.15	0.1013	91.146	0.017	L-VALINE	MJ+MI(11)
	313.15	0.1013	92.316	0.021	L-VALINE	MJ+MI(11)
32			V [cm ³ /mol]			
	285.15	0.1013	105	0	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
	293.15	0.1013	106	0	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
	298.15	0.1013	102	0	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
	313.15	0.1013	106	0	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
			H[kJ/MOL]			
	298.15	0.1013	50	1	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
			G[kJ/MOL]			
	298.15	0.1013	0.5071	2.5	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	TN+SH+SK+CHP+PW+KK(11)
33			G[kJ/MOL]			
	298.15	0.1013	4.950	0	DI-N-BUTYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	318.15	0.1013	6.105	0	DI-N-BUTYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	323.15	0.1013	8.217	0	DI-N-BUTYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	328.15	0.1013	9.322	0	DI-N-BUTYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	333.15	0.1013	10.392	0	DI-N-BUTYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	298.15	0.1013	2.096	0	DI-ISOPROPYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	318.15	0.1013	3.304	0	DI-ISOPROPYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	323.15	0.1013	5.000	0	DI-ISOPROPYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	328.15	0.1013	5.678	0	DI-ISOPROPYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	333.15	0.1013	6.884	0	DI-ISOPROPYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	298.15	0.1013	-0.929	0	TERT-BUTYL-ETHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	318.15	0.1013	0.380	0	TERT-BUTYL-ETHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	323.15	0.1013	2.959	0	TERT-BUTYL-ETHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	328.15	0.1013	3.919	0	TERT-BUTYL-ETHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	333.15	0.1013	5.736	0	TERT-BUTYL-ETHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	298.15	0.1013	0.384	0	TERT-BUTYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	318.15	0.1013	1.355	0	TERT-BUTYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	323.15	0.1013	1.907	0	TERT-BUTYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	328.15	0.1013	2.160	0	TERT-BUTYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
	333.15	0.1013	3.631	0	TERT-BUTYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)

298.15	0.1013	4.550	0	PROPYL-VINYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
318.15	0.1013	5.618	0	PROPYL-VINYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
323.15	0.1013	6.485	0	PROPYL-VINYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
328.15	0.1013	7.312	0	PROPYL-VINYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
333.15	0.1013	7.713	0	PROPYL-VINYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
298.15	0.1013	-1.329	0	TERT-AMYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
318.15	0.1013	0.380	0	TERT-AMYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
323.15	0.1013	2.587	0	TERT-AMYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
328.15	0.1013	3.605	0	TERT-AMYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)
333.15	0.1013	4.141	0	TERT-AMYL-METHYL-ETHER	IH+HK+SP(10)

34	V [cm ³ /mol]				
298	0.1013	35.94	0.07	POTASSIUM NITRATE	MP+SA(07)
303	0.1013	36.84	0.20	POTASSIUM NITRATE	MP+SA(07)
308	0.1013	37.22	0.20	POTASSIUM NITRATE	MP+SA(07)
313	0.1013	37.67	0.23	POTASSIUM NITRATE	MP+SA(07)
298	0.1013	55.04	0.11	AMMONIUM SULPHATE	MP+SA(07)
303	0.1013	55.58	0.05	AMMONIUM SULPHATE	MP+SA(07)
308	0.1013	55.88	0.09	AMMONIUM SULPHATE	MP+SA(07)
313	0.1013	55.99	0.09	AMMONIUM SULPHATE	MP+SA(07)
298	0.1013	295.80	0.44	TETRA-BUTYL AMMONIUM-BROMIDE	MP+SA(07)
303	0.1013	296.04	0.80	TETRA-BUTYL AMMONIUM-BROMIDE	MP+SA(07)
308	0.1013	297.47	0.26	TETRA-BUTYL AMMONIUM-BROMIDE	MP+SA(07)
313	0.1013	299.09	0.48	TETRA-BUTYL AMMONIUM-BROMIDE	MP+SA(07)
298	0.1013	298.65	0.57	TETRA-BUTYL AMMONIUM-IODIDE	MP+SA(07)
303	0.1013	299.81	0.60	TETRA-BUTYL AMMONIUM-IODIDE	MP+SA(07)
308	0.1013	304.74	0.82	TETRA-BUTYL AMMONIUM-IODIDE	MP+SA(07)
313	0.1013	319.70	0.46	TETRA-BUTYL AMMONIUM-IODIDE	MP+SA(07)
298	0.1013	67.90	0.60	AMMONIUM NICKEL-SULPHATE	MP+SA(07)
303	0.1013	78.69	0.76	AMMONIUM NICKEL-SULPHATE	MP+SA(07)
308	0.1013	82.13	0.68	AMMONIUM NICKEL-SULPHATE	MP+SA(07)

313	0.1013	89.17	0.95	AMMONIUM NICKEL-SULPHATE	MP+SA(07)
298	0.1013	291.34	0.06	AMMONIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
303	0.1013	298.26	0.32	AMMONIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
308	0.1013	327.37	0.23	AMMONIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
313	0.1013	304.83	1.45	AMMONIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
298	0.1013	281.73	0.88	POTASSIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
303	0.1013	287.69	0.28	POTASSIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
308	0.1013	323.13	0.29	POTASSIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
313	0.1013	313.70	0.28	POTASSIUM ALUMINIUM-SULPHATE	MP+SA(07)
298	0.1013	222.19	0.15	AMMONIUM CERIC-NITRATE	MP+SA(07)
303	0.1013	234.60	0.63	AMMONIUM CERIC-NITRATE	MP+SA(07)
308	0.1013	244.29	0.34	AMMONIUM CERIC-NITRATE	MP+SA(07)
313	0.1013	254.83	0.81	AMMONIUM CERIC-NITRATE	MP+SA(07)

35	V [cm ³ /mol]				
278.15	0.1013	84.63	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
283.15	0.1013	85.11	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
288.15	0.1013	85.47	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
293.15	0.1013	85.79	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
298.15	0.1013	86.34	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
303.15	0.1013	86.82	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
308.15	0.1013	87.63	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
313.15	0.1013	88.64	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
318.15	0.1013	89.31	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
323.15	0.1013	89.92	0	1-BUTANOL	CR+JL+GG(08)
278.15	0.1013	85.02	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
283.15	0.1013	85.22	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
288.15	0.1013	85.53	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
293.15	0.1013	85.80	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
298.15	0.1013	86.16	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
303.15	0.1013	86.58	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)

308.15	0.1013	86.91	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
313.15	0.1013	87.31	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
318.15	0.1013	87.66	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
323.15	0.1013	88.67	0	1,2-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
278.15	0.1013	87.88	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
283.15	0.1013	87.99	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
288.15	0.1013	88.12	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
293.15	0.1013	88.19	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
298.15	0.1013	88.27	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
303.15	0.1013	88.38	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
308.15	0.1013	88.55	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
313.15	0.1013	88.77	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
318.15	0.1013	89.05	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
323.15	0.1013	89.37	0	1,4-BUTANEDIOL	CR+JL+GG(08)
278.15	0.1013	87.79	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
283.15	0.1013	87.92	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
288.15	0.1013	88.03	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
293.15	0.1013	88.15	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
298.15	0.1013	88.26	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
303.15	0.1013	88.38	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
308.15	0.1013	88.55	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
313.15	0.1013	88.77	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
318.15	0.1013	89.10	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
323.15	0.1013	89.4	0	1,2,4-BUTANETRIOL	CR+JL+GG(08)
278.15	0.1013	85.01	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
283.15	0.1013	85.46	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
288.15	0.1013	86.54	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
293.15	0.1013	87.09	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
298.15	0.1013	87.84	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
303.15	0.1013	88.62	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
308.15	0.1013	90.19	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
313.15	0.1013	91.48	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
318.15	0.1013	92.09	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)
323.15	0.1013	93.31	0	1,2,3,4-BUTANETETROL	CR+JL+GG(08)

36	V [cm ³ /mol]					
293.15	0.1013	271.96	0.07	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
298.15	0.1013	272.67	0.11	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
303.15	0.1013	273.38	0.23	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
313.15	0.1013	275.61	0.17	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
323.15	0.1013	277.86	0.15	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
333.15	0.1013	280.43	0.06	TETRAETHYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
293.15	0.1013	337.05	0.03	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
298.15	0.1013	338.25	0.03	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
303.15	0.1013	339.56	0.03	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
313.15	0.1013	342.25	0.04	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
323.15	0.1013	345.41	0.04	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
333.15	0.1013	348.44	0.05	TETRA-N-PROPYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
293.15	0.1013	397.85	0.07	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
298.15	0.1013	399.57	0.06	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
303.15	0.1013	401.81	0.02	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
313.15	0.1013	405.86	0.02	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
323.15	0.1013	410.95	0.02	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
333.15	0.1013	415.42	0.04	TETRA-N-BUTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
293.15	0.1013	460.85	0.06	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
298.15	0.1013	462.99	0.04	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
303.15	0.1013	464.60	0.03	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
313.15	0.1013	469.03	0.02	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
323.15	0.1013	474.20	0.01	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	
333.15	0.1013	480.11	0.01	TETRA-N-PENTYLAMMONIUM- CYCLOHEXYLSULFAMATES	CK+JH+DT(07)	

37	V [cm ³ /mol]					
	293.15	0.1013	100.33	0.0103	OXALIC-ACID	RG+MS(07)
	303.15	0.1013	102.91	0.0024	OXALIC-ACID	RG+MS(07)
	313.15	0.1013	105.39	0.0010	OXALIC-ACID	RG+MS(07)
	323.15	0.1013	106.05	0.0115	OXALIC-ACID	RG+MS(07)
38	G[kJ/MOL]					
	283.15	0.1013	-3.149	0.13	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	288.15	0.1013	-2.392	0.14	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-0.622	0.08	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-0.653	0.06	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	308.15	0.1013	0.939	0.07	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	318.15	0.1013	2.445	0.14	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	283.15	0.1013	-3.595	0.10	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	288.15	0.1013	-2.866	0.11	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	293.15	0.1013	-2.286	0.12	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-1.730	0.11	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-1.855	0.06	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	303.15	0.1013	-1.168	0.10	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	308.15	0.1013	-0.534	0.08	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	318.15	0.1013	0.452	0.12	VINYL-ACETATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	283.15	0.1013	-8.655	0.13	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	288.15	0.1013	-7.954	0.16	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-6.771	0.09	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-6.856	0.05	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	308.15	0.1013	-5.630	0.12	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	318.15	0.1013	-4.670	0.16	DIMETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	283.15	0.1013	-8.351	0.11	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	288.15	0.1013	-7.184	0.11	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-5.684	0.12	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	298.15	0.1013	-5.648	0.06	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	308.15	0.1013	-4.362	0.07	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)
	318.15	0.1013	-3.031	0.06	DIETHYL-CARBONATE	AB+AP+PV+VD+GS(08)

39	V [cm ³ /mol]					
	298.15	0.1013	108.14	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	303.15	0.1013	108.68	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	308.15	0.1013	109.17	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	313.15	0.1013	109.49	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	318.15	0.1013	109.93	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	323.15	0.1013	110.44	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	328.15	0.1013	110.94	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	333.15	0.1013	111.45	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
	338.15	0.1013	111.92	0	N-METHYLDIETHANOLAMINE	AM+MM+TM+AS(08)
40	G[kJ/MOL]					
	293.2	0.1013	3.525	0	PROPYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	303.1	0.1013	5.337	0	PROPYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	333.1	0.1013	7.794	0	PROPYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	292.8	0.1013	4.016	0	BUTYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	312.8	0.1013	6.559	0	BUTYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	332.8	0.1013	8.594	0	BUTYL-MERCAPTAN	CC+SL+DR(08)
	292.6	0.1013	0.974	0	DIMETHYLSULFIDE	CC+SL+DR(08)
	302.7	0.1013	2.106	0	DIMETHYLSULFIDE	CC+SL+DR(08)
	312.5	0.1013	3.133	0	DIMETHYLSULFIDE	CC+SL+DR(08)
	332.8	0.1013	5.217	0	DIMETHYLSULFIDE	CC+SL+DR(08)
41	H[kJ/MOL]					
	298.15	0.1013	-81.80	0.275	UREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-84.98	0.265	N-METHYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-88.96	0.63	N-ETHYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-92.75	0.36	N-PROPYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-94.71	0.285	N-BUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-93.75	0.66	N-ISOBUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	298.15	0.1013	-87.20	0.535	N-TERT-BUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
	C _p [J/K*MOL]					
	298.15	0.1013	74.2	0.6	UREA	GG+EB+MJ+PV(07)

298.15	0.1013	143.9	0.65	N-METHYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
298.15	0.1013	227.1	0.7	N-ETHYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
298.15	0.1013	320.6	4.5	N-PROPYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
298.15	0.1013	415.3	1.3	N-BUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
298.15	0.1013	351.7	3.0	N-ISOBUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)
298.15	0.1013	332.8	0.65	N-TERT-BUTYLUREA	GG+EB+MJ+PV(07)

42

V [cm³/mol]

278.15	0.10	83.09	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
283.15	0.10	83.56	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
288.15	0.10	83.99	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
293.15	0.10	84.47	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
298.15	0.10	84.92	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
308.15	0.10	85.90	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
318.15	0.10	86.87	0.04	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
298.17	0.52	84.93	0.05	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
318.14	0.51	86.90	0.05	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
338.18	0.51	89.05	0.06	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
358.14	0.52	91.45	0.07	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
373.17	0.52	93.43	0.08	CYCLOPENTANONE	IC+LS+LH(10)
278.15	0.10	97.12	0.04	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
283.15	0.10	97.76	0.04	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
288.15	0.10	98.33	0.04	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
293.15	0.10	98.95	0.04	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
298.15	0.10	99.51	0.05	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
308.15	0.10	100.68	0.05	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
318.15	0.10	101.88	0.05	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
298.17	0.52	99.51	0.04	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
318.14	0.51	101.89	0.06	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
338.18	0.51	104.45	0.09	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
358.14	0.52	107.27	0.09	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
373.17	0.52	109.55	0.09	CYCLOHEXANONE	IC+LS+LH(10)
278.15	0.10	111.54	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
283.15	0.10	112.21	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)

	288.15	0.10	112.78	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	293.15	0.10	113.40	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	298.15	0.10	114.00	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	308.15	0.10	115.21	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	318.15	0.10	116.47	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	298.17	0.52	114.02	0.07	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	318.14	0.51	116.56	0.09	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	338.18	0.51	119.30	0.11	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	358.14	0.52	122.42	0.12	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	373.17	0.52	124.97	0.12	CYCLOHEPTANONE	IC+LS+LH(10)
	278.15	0.10	88.94	0.19	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	283.15	0.10	89.90	0.18	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	288.15	0.10	90.67	0.18	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	293.15	0.10	91.59	0.17	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	298.15	0.10	92.40	0.17	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	308.15	0.10	94.00	0.16	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	318.15	0.10	95.44	0.15	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	298.17	0.52	92.33	0.14	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	318.14	0.51	95.61	0.16	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	338.18	0.51	95.23	0.22	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	358.14	0.52	100.76	0.22	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
	373.17	0.52	102.58	0.22	CYCLOHEXANE-1.4-DIONE	IC+LS+LH(10)
43			V [cm ³ /mol]			
	298.15	0.1013	76.7	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
	303.15	0.1013	76.9	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
	313.15	0.1013	77.3	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
	323.15	0.1013	77.8	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
	333.15	0.1013	78.3	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
	343.15	0.1013	78.9	0	2-METHYLAMINO-ETHANOL	JL+MM+PT+AH(07)
44			V [cm ³ /mol]			
					TETRABUTYLAMMONIUM	
	278.15	0.1013	295.64	0.17	BROMIDE	LB+YS+EV(08)

				TETRABUTYLAMMONIUM	
288.15	0.1013	296.73	0.07	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRABUTYLAMMONIUM	
293.15	0.1013	299.39	0.18	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRABUTYLAMMONIUM	
298.15	0.1013	299.90	0.12	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAETHYLAMMONIUM	
278.15	0.1013	170.65	0.30	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAETHYLAMMONIUM	
288.15	0.1013	171.40	0.10	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAETHYLAMMONIUM	
293.15	0.1013	172.22	0.19	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAETHYLAMMONIUM	
298.15	0.1013	173.29	0.09	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAMETHYLAMMONIUM	
278.15	0.1013	111.81	0.22	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAMETHYLAMMONIUM	
288.15	0.1013	112.05	0.05	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAMETHYLAMMONIUM	
293.15	0.1013	113.44	0.11	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
				TETRAMETHYLAMMONIUM	
298.15	0.1013	113.98	0.11	BROMIDE	LB+YS+EV(08)
45		G[kJ/MOL]			
371.7	0.1013	-0.433	0.248	HEXANAL	MH+HS+KS+KG(07)
371.7	0.1013	0.108	0.356	2-METHYLBUTANAL	MH+HS+KS+KG(07)
371.7	0.1013	-0.006	0.267	3-METHYLBUTANAL	MH+HS+KS+KG(07)
371.7	0.1013	0.956	0.208	DIMETHYLSULFIDE	MH+HS+KS+KG(07)
46		G[kJ/MOL]			
373.15	0.1013	-6.199	0.082	2-FURFURAL	MH+KS(06)
373.15	0.1013	-8.969	0.055	γ -NONALACTONE	MH+KS(06)
373.15	0.1013	-3.054	0.148	BENZALDEHYDE	MH+KS(06)
373.15	0.1013	-1.394	0.112	LINALOOL	MH+KS(06)
47		V [cm ³ /mol]			
288.15	0.1013	92.108	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)
293.15	0.1013	93.824	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)
298.15	0.1013	95.245	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)
303.15	0.1013	96.371	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)
308.15	0.1013	97.202	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)

	313.15	0.1013	97.738	0	TRIPOTASSIUM CITRATE	RS+FZ(07)
48			V [cm ³ /mol]			
	298.15	0.1013	105.522	1.914	CESIUM TRIFLUOROACETATE	SK(08)
	303.15	0.1013	109.259	1.905	CESIUM TRIFLUOROACETATE	SK(08)
	308.15	0.1013	113.028	1.901	CESIUM TRIFLUOROACETATE	SK(08)
	313.15	0.1013	115.487	1.965	CESIUM TRIFLUOROACETATE	SK(08)